

De Collectieve Excitatie van een p-golf Fermionisch Gas

*Proefschrift ter verkrijging van de graad van
Master in de Fysica*

JEROEN VAN LOOCK

*Promotor: Prof. Dr. Jacques Tempere
Universiteit Antwerpen, Faculteit wetenschappen,
Departement Fysica,
Theorie van Kwantumsystemen en Complexe Systemen
2022-2024*



University of Antwerp
TQC | Theory of Quantum Systems
and Complex Systems

Samenvatting

De atomen in fermionische gassen zullen bij zeer lage temperaturen paren vormen. Deze paren kunnen zwak gebonden zijn, of ze kunnen zeer sterk gebonden zijn waardoor ze diatomaire moleculen vormen. Deze paren gedragen zich als bosonen en kunnen bijgevolg condenseren naar de grondtoestand. In het geval van de zwak gebonden paren leidt dit tot de vorming van een Bardeen-Cooper-Schrieffer fluïdum (BCS), in het geval van sterk gebonden paren tot een Bose-Einstein condensaat (BEC). Aan de hand van een extern magneetveld kan de interactie tussen de atomen zodanig getuned worden, dat er kan worden overgegaan van het BCS fluïdum naar het BEC fluïdum. Dit veeldeeltjes systeem vertoont collectieve excitaties, die ook experimenteel kunnen worden gemeten aan de hand van responsfuncties. De meeste studies van deze excitaties, beschrijven het systeem met contact-interacties, wat de laagst energetische interacties zijn. In deze thesis zal dit worden uitgebreid naar p-golf interacties, wat na contact-interacties de laagst energetische interactie is. Hierbij zijn er drie collectieve excitaties teruggevonden: een geluidsachtige energietak, een tak die overeenkomt met het breken van de paren en een continuüm dat eveneens geassocieerd wordt met het breken van de paren. De belangrijkste bevinding hierbij is dat de paarbrekingsmode, in tegenstelling tot de contact-interacties, geen bandkloof heeft voor negatieve chemische potentialen (BCS regime), maar wel een bandkloof heeft van twee maal de chemische potentiaal als deze positief wordt (BEC regime). p-golf superfluida krijgen veel belangstelling vanuit theoretisch en experimenteel vlak, omdat deze zouden kunnen leiden tot robuuste qubits. De collectieve excitaties zijn hierbij zowel op experimenteel als op theoretisch vlak belangrijk omdat ze de respons van het systeem beschrijven.

Abstract

Atoms in fermionic gases will form pairs at very low temperatures. These pairs can be weakly bound or very strongly bound, resulting in diatomic molecules. These pairs behave as bosons and can consequently condense to the ground state. In case of weakly bound pairs, this leads to the formation of a Bardeen-Cooper-Schrieffer fluid (BCS), while in the case of strongly bound pairs, it results in a Bose-Einstein condensate (BEC). By applying an external magnetic field, the interaction between the atoms can be tuned such that a transition occurs from the BCS fluid to the BEC fluid. This many-body system exhibits collective excitations, which can also be experimentally measured through response functions. Most studies of these excitations describe the system using contact interactions, which are the lowest-energy interactions. In this thesis, we extend this to p-wave interactions, which are the second lowest-energy interactions. Three collective excitations have been identified: a sound-like energy branch, a branch corresponding to pair breaking, and a continuum that is also associated with pair breaking. The most important finding is that the pair-breaking mode, unlike contact interactions, does not have a band gap for negative chemical potentials (BCS regime), but it has a band gap of twice the chemical potential when it becomes positive (BEC regime). p-wave superfluids attract a lot of interest from both theoretical and experimental perspectives, as they could lead to robust qubits. These collective excitations are important to describe the system's response.

Dankwoord

Eerst en vooral wil ik prof. Tempere bedanken om mij te begeleiden en mij steeds enthousiast op zijn bureau te ontvangen. Ik heb zeer veel van hem geleerd tijdens het schrijven van deze thesis, tijdens het schrijven van mijn bachelorthesis en tijdens alle vakken die hij doceert. Lucas Levrouw wil ik ook bedanken voor de vele hulpvolle gesprekken, en de ander leden van de groep (TQC) om mij te verwelkomen binnen de groep. Verder dank ik mijn ouders, broer en vriendin voor de aanmoediging tijdens het schrijven van deze thesis. Nu het einde van mijn master opleiding in zicht komt, wil ik ook mijn vrienden en medestudenten bedanken om van mijn studententijd een fijne ervaring te maken.

Inhoudsopgave

1	Inleiding	1
1.1	Ultrakoude gassen	1
1.1.1	Bose-Einstein condensaat	2
1.1.2	Bardeen-Cooper-Schrieffer fluïdum	2
1.1.3	De BEC-BCS overgang	3
1.1.4	Feshbach resonanties	3
1.2	p-golf interacties	4
1.2.1	Partieelgolven	4
1.2.2	Partieelgolven in ultrakoude gassen	5
1.3	Collectieve excitaties in fermionische superfluida	6
1.4	Doel en opbouw van de thesis	8
2	Kwantumveldentheorie	9
2.1	Grassmann algebra	9
2.2	Padintegralen	9
2.3	De partitiefunctie	12
2.4	Fermionische padintegralen	13
2.5	Van Hamiltoniaan naar padintegraal	14
3	Zadelpuntsbenadering	16
3.1	Inleiding	16
3.2	Opstellen van de Euclidische actie	16
3.3	Fouriertransformatie van de Euclidische actie	18
3.4	p-golf potentiaal	20
3.4.1	Afleiding effectieve potentiaal	20
3.4.2	Verstrooiingsvolume en effectieve interactie-afstand	22
3.5	De toestandssom	24
3.6	Nambu spinoren	26
3.7	Zadelpuntsbenadering	27
3.7.1	De Bogoliubov energie	29
3.8	Vrije energie	30
3.8.1	Temperatuur nul	34
4	Gaussische fluctuaties	38
4.1	Nambu spinoren voor Gaussische fluctuaties	38
4.1.1	Niet diagonale Greense functies	38
4.1.2	De veralgemeende Greense Functie	40
4.1.3	Expansie van de fluctuaties	41

4.2	Toestandssom met Gaussische fluctuaties	42
4.3	Fermionische Matsubara som	45
4.4	Scheiden in partieelbreuken	48
4.5	Uitdrukkingen symmetrisch maken	50
4.6	Actie in de amplitude en fase basis	51
4.7	$1/g$ -deel	52
4.8	De fluctuatie toestandssom	53
5	Responsfuncties	54
5.1	Van Greense functies naar responsfunctie	54
5.2	Responsfuncties	56
5.2.1	Diep BCS	57
5.2.2	Diep BEC	60
5.2.3	BEC-BCS transitie	62
5.2.4	Vergelijking met Wang et al.	62
5.3	Vooruitblik	62
6	Conclusie	64

Hoofdstuk 1

Inleiding

Het belangrijkste doel van deze thesis, is de collectieve excitaties van p-golf fermionische atomaire gassen doorheen de BEC-BCS transitie beschrijven. Vooraleer hier dieper op in te gaan, zal in dit eerste hoofdstuk een kort overzicht worden gegeven van atomaire gassen en meer specifiek van fermionische atomaire gassen. Dan zal zeer kort het principe van partieelgolven worden geïntroduceerd, en zullen p-golf interacties nader worden besproken. Hierna, zullen de collectieve excitaties van fermionische gassen worden besproken. Dit hoofdstuk zal dan eindigen met de doelen van en een algemeen overzicht van de thesis.

1.1 Ultrakoude gassen

In deze sectie zal een kort overzicht worden gegeven over ultrakoude gassen en in het bijzonder over ultrakoude fermionische gassen. Deze sectie is gebaseerd op [51, 68, 62, 60, 53].

De atomen van gassen bij kamertemperatuur kunnen worden beschreven door massapunten die met elkaar kunnen botsen. De gemiddelde snelheid van deze massapunten kan beschreven worden met de formule $(3/2)k_B T = \langle p^2 \rangle / (2m)$, waarbij k_B de Boltzmann constante is, T de temperatuur, p de impuls en m de massa. De $\langle \cdot \rangle$ komt overeen met de uitmiddeling door gebruik te maken van Boltzmann statistiek. Sinds de Broglie is het ook geweten dat bij lagere temperaturen deze simplistische beschrijving echter niet meer geldig is en dat de atomen moeten worden beschreven als golfpakketten. Door de deeltjes te beschrijven als een golfpakket, zal hier ook een bepaalde onzekerheid mee overeenkomen in zowel de impuls Δp , als in positie van het deeltje Δx . Deze onzekerheden kunnen op zichzelf nul worden, maar kunnen nooit tegelijk nul worden door het Heisenberg's onzekerheidsprincipe ($\Delta x \Delta p < h/(4\pi)$). Dit heeft als effect dat als het gas wordt afgekoeld, de kinetische energie en dus ook de gemiddelde impuls van de atomen zal afnemen wat maakt dat de onzekerheid op de impuls ook afneemt ($\Delta p < \sqrt{\langle p^2 \rangle} = \sqrt{3mk_B T}$), maar dat de onzekerheid van de positie van het deeltje zal toenemen. Deze onzekerheid op de positie wordt gekarakteriseerd door de Broglie golflengte

$$\lambda_{dB} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}}. \quad (1.1)$$

Als deze onzekerheid nu zodanig groot wordt dat deze groter is dan de gemiddelde afstanden tussen de atomen, zullen de golf functies van de atomen overlappen en kan het gas niet

meer klassiek worden beschreven. De kwantumstatistische beschrijving van zo'n kwantumgas is anders voor de twee verschillende soorten deeltjes. Bosonen (deeltjes met een even spin) kunnen allemaal dezelfde toestand bezetten en zullen voldoen aan de Bose-Einstein statistiek, wat maakt dat ze een Bose-Einstein condensaat (BEC) zullen vormen. Fermionen (halfvullige spin) kunnen niet dezelfde toestand bezetten door het Pauli exclusie principe en voldoen aan de Fermi-Dirac statistiek, zij kunnen een Bardeen-Cooper-Schrieffer fluïdum (BCS) vormen.

Deze twee soorten kwantumgassen zijn belangrijk in de beschrijving van superfluïda. Superfluïda komen voor in een zeer brede klasse aan kwantumgassen en zijn sterk gecorreleerd aan concepten als dissipatieloos vloeien, gekwantiseerde vortices en het vloeien zonder entropie. Als het gas uit geladen deeltjes bestaat, leidt dit tot supergeleiding. In de volgende secties wordt een kort overzicht van de belangrijkste eigenschappen van zowel het BEC als het BCS superfluïdum besproken. Hierbij zal worden aangenomen dat de lezer bekend is met de basisprincipes van de statistische fysica.

1.1.1 Bose-Einstein condensaat

Bose had origineel de statistiek opgesteld voor fotonen, die later is uitgebreid door Einstein naar deeltjes met een massa. Dit heeft geleid tot de beroemde Bose-Einstein verdeling:

$$n^B(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1}, \quad (1.2)$$

waarbij n^B het aantal deeltjes is die zich in een bepaalde toestand met energie ϵ bevinden, $\beta = (k_b T)^{-1}$ is de inverse temperatuur en μ is de chemische potentiaal (deze parameter legt het aantal deeltjes vast). De belangrijkste eigenschap van deze verdeling is dat wanneer de temperatuur daalt, meer en meer atomen zich in de grondtoestand zullen plaatsen omdat het aantal geëxciteerde toestanden beperkt is. Als de temperatuur naar nul wordt gebracht zullen alle atomen zich in de grondtoestand bevinden. Vanaf er een macroscopische hoeveelheid aan atomen zich in de grondtoestand bevinden, wordt het gas een Bose-Einstein condensaat (BEC) genoemd.

Deze theorie was door London [40] eerst gesuggereerd om de superfluiditeit in de experimenten in vloeibaar helium, zoals die van onder andere Kapitza [28], Allen en Misener [1] uit 1938, te verklaren. De effectieve theoretische uitwerking heeft tot de werken van Bogoliubov [7], Penrose [47], Feynman [21] en Onsager [48] geduurd tot deze connectie volledig begrepen was. Pas in 1995 werd het eerste condensaat uit atomaire gassen gerealiseerd door onder andere Cornell, Wieman en Ketterle [2, 15].

1.1.2 Bardeen-Cooper-Schrieffer fluïdum

Fermionen kunnen niet zoals bosonen in dezelfde toestand worden geplaatst door het Pauli uitsluitingsprincipe. Dit zorgt er dan ook voor dat de verdeling van de fermionen niet wordt beschreven met de Bose-Einstein verdeling, maar met de Fermi-Dirac verdeling:

$$n^F(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} + 1}. \quad (1.3)$$

Deze distributie gedraagt zich zeer anders dan de Bose-Einstein verdeling. Als de temperatuur naar nul gaat, worden startend van het grondniveau de energieniveaus opgevuld als er

fermionen worden toegevoegd. De distributie herleidt zich naar een stapfunctie die gelijk is aan één voor energieën lager dan μ en nul voor energieën hoger dan μ .

De theorie voor de superfluiditeit voor (zwak interagerende) fermionen was origineel opgesteld in de context van supergeleiding waar het gas bestaat uit elektronen. Deze supergeleiding werd voor het eerst waargenomen in 1911 toen Onnes kwik afkoelde met vloeibaar helium [61]. Schafroth had in 1954 gesuggereerd dat een supergeleider bestond uit een Bose-Einstein condensaat van “twee-elektron gebonden toestanden” onder een bepaalde kritische temperatuur [50]. Cooper heeft dan ontdekt dat er een kleine attractieve interactie bestond tussen elektronen met tegengestelde spin en tegengestelde impuls [14] en heeft later in 1957 met Bardeen en Schrieffer de Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) theorie opgesteld [5]. Deze theorie verklaarde vanuit een veeldeeltjes standpunt de supergeleiding door het condenseren van Cooperparen (elektron paren) met nul massacentrum impuls en nul totale spin. Ook al vormen de elektronen paren, ze zullen door hun zwakke koppeling zich zodanig ver uit elkaar bevinden dat de verschillende paren met elkaar kunnen overlappen. De excitaties uit deze grondtoestand hebben een bandkloof Δ (zie verder voor een rigoureuse definitie), deze excitaties komen overeen met het opbreken van een paar in twee fermionen.

De theorie is ook uitgebreid naar complexere systemen met hoger angulair moment, verschillende spins, etc. In 1969 werd deze theorie uitgebreid door Eagles naar de beschrijving van atomaire gassen [17] en in de jaren 70 werd de theorie uitgebreid naar ^3He [37, 38].

1.1.3 De BEC-BCS overgang

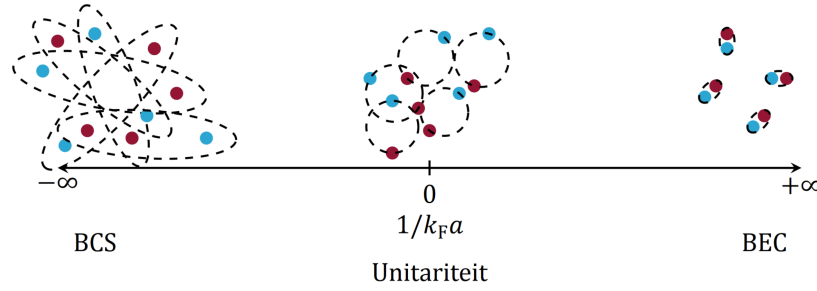
In de twee laatste secties is zeer kort aangehaald hoe bosonen een BEC kunnen vormen en fermionen een BCS. Er is echter ook een overgang mogelijk tussen het BEC en BCS regime in atomaire gassen. Deze overgang kan gebeuren als de interactiesterkte getuned kan worden (zie volgende sectie), zoals geïllustreerd wordt in figuur 1.1. Bij zwak interagerende fermigassen zal, zoals besproken in de vorige sectie, een BCS worden gevormd. Als daarentegen de fermionen zeer sterk interageren zullen deze diatomaire molecule vormen die nu geen halftallige maar een heeltallige spin hebben. Deze diatomaire moleculen zijn dus bosonen en kunnen bijgevolg ook een BEC vormen. Het basismechanisme van deze overgang werd pas in 1980 uitgewerkt door Leggett [36] en de overgang is in 2004 het eerst experimenteel waargenomen door Regal [49].

Zoals ook uit figuur 1.1 duidelijk is, wordt deze interactiesterkte uitgedrukt door het inverse van de dimensieloze verstrooiingslengte¹ of $(k_f a)^{-1}$, waarbij k_f en de fermigolfvector is a de s-golf verstrooiingslengte. De zwakke interactie limiet (BCS) komt overeen met $(k_f a)^{-1} \ll -1$ en de zeer sterke limiet (BEC) komt overeen met $(k_f a)^{-1} \gg 1$. De crossover tussen deze twee regimes gebeurt rond unitariteit (waar $(k_f a)^{-1} = 0$), waar $|(k_f a)^{-1}| \lesssim 1$. Op unitariteit zelf verandert er niets drastisch in het gedrag van het fluïdum.

1.1.4 Feshbach resonanties

Aangezien het overgaan van een BEC naar een BCS superfluïda experimenteel wordt gerealiseerd met Feshbach resonanties, zal hier kort op worden ingegaan. Als twee atomen met

¹Deze uitdrukking is correct als er wordt gewerkt met contactpotentialen, wat in veel gevallen een goede benadering is. Echter in deze thesis zal er worden gewerkt met een moeilijkere potentiaal, en zal de sterkte worden uitgedrukt als $(k_f^3 a)^{-1}$, waarbij a nu het verstrooiingsvolume is. Dit zal later in de thesis duidelijk worden.



Figuur 1.1: Een schematische voorstelling van de BEC-BCS overgang. De as komt overeen met het inverse van de dimensieloze verstrooiingslengte. Zeer negatieve waarden komen overeen met een zwak gebonden paren en zeer positieve waarden met een sterke gebonden paren. [62]

elkaar interageren kunnen deze een gebonden toestand vormen. Deze toestand kan zowel een echte gebonden toestand zijn of een virtuele toestand zijn [23]. Deze gebonden toestand kan voorkomen in een gesloten verstrooiingskanaal en resonant worden met de energie van het verstrooide atoom in een open verstrooiingskanaal. Dit noemt men een Feshbach resonantie. De resonantie kan experimenteel gemanipuleerd worden doordat het energieverschil tussen open en gesloten kanaal aanpasbaar is door middel van een magneetveld. Dit is grafisch weergegeven in Figuur 1.2. Op resonantie zal ook de sterkte van de interactie van de atomen binnen dit kanaal divergeren, waardoor er een zeer grote controle is over deze interactie. De interactiesterkte wordt bepaald door een parameter die de verstrooiingslengte heet. Hoe groter deze parameter is, hoe sterker de interactie.

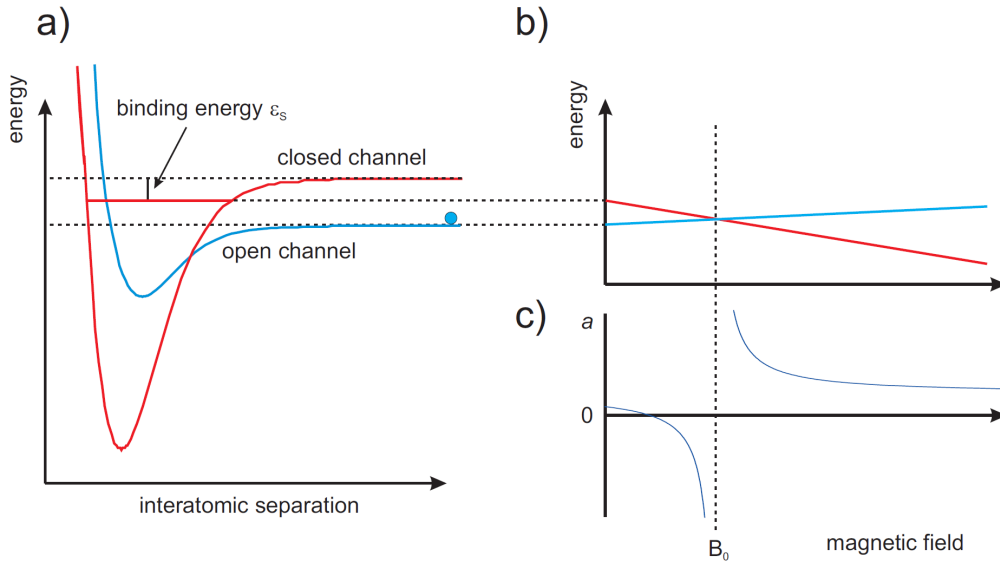
1.2 p-golf interacties

Naast het variëren van de sterkte van de interactie, kan ook de vorm van interactie wijzigen. In deze thesis zal er worden gewerkt met p-golf interacties.

1.2.1 Partieelgolven

Vooraleer p-golf interacties worden besproken in de specifieke context van atomaire gassen, zal algemeen het idee van partieelgolven kort worden herhaald. Een meer mathematische discussie is terug te vinden in sectie 3.4.2, waar de interactiepotentiaal effectief zal worden afgeleid.

Als atomen (of in het algemeen deeltjes) interageren via een sferisch symmetrische potentiaal, zal dit maken dat hun totaal angulair moment (met kwantumgetallen $\{l, m\}$) behouden blijft na de interactie. Bijgevolg kan de golf functie van een bepaald deeltje ontwikkeld worden in partieelgolven, wat een basis is die overeenkomt met diezelfde kwantumgetallen. Daarbovenop komt dat de interactiepotentiaal eveneens in functie van deze kwantumgetallen kan ontwikkeld worden, zodanig dat een specifiek deel van de potentiaal overeenkomt met een specifiek angulair moment. De angulaire momenten van deze deeltjes komen ook overeen met bepaalde energieën, zo komt de laagste orde expansie $\{l = 0, m = 0\}$ overeen met de laagst energetische toestand van deze deeltjes. Deze eerste term komt overeen met s-golf



Figuur 1.2: Schematische voorstelling van een Feshbach resonantie. Figuur a komt overeen met het energiediagram van het gesloten kanaal en open kanaal kanaal in functie van de afstand tussen de atomen. Hierbij is één enkele gebonden toestand weergegeven. Figuur b toont dat door een magnetisch veld aan te leggen deze energieën door het Zeeman-effect op elkaar kunnen worden afgestemd en figuur c toont hiervan het effect op de verstrooiingslengte (of het verstrooiingsvolume). [58]

interacties, de interactiepotentiaal die met dit deel overeenkomt is sferisch symmetrisch. De volgende term in de ontwikkeling komt overeen met p-golf interacties. Deze term bestaat uit drie individuele termen die allen dezelfde energie hebben maar elk overeenkomen met een andere m , die gelijk kan zijn aan -1 , 0 of 1 .

1.2.2 Partieelgolven in ultrakoude gassen

Zulke p-golf interacties zijn al een lange tijd gekend als het paringsmechanisme in ^3He [19, 63]. Daarnaast is er veel aandacht voor p-golf interacties in supergeleiding omdat dit zou leiden tot topologische supergeleiders [39, 19]. Deze toestanden zijn bij de meest gewilde veeldeeltjes toestanden in de vastestoffysica omdat deze gelinkt zijn aan de klasse van fractionele kwantum Hall states met niet-abelse statistiek [39]. Er is nu ook veel aandacht voor dit paringsmechanisme in p-golf superfluida [19]. Eén van de redenen hiervoor is dat deze topologische eigenschappen zijn voorspeld in p-golf fermionische atomaire gassen [39]. Deze zouden kunnen leiden tot Majorana (een deeltje dat zijn eigen antideeltje is) fermionen in de kernen van vortices, waarbij de vortices een niet-abelse statistiek hebben [18, 19, 44]. Deze statistiek kan leiden tot topologisch beschermde toestanden die kunnen gebruikt worden robuuste qubits [19]. Hiernaast zou dit paringsmechanisme tot (spin)triplet superfluiditeit kunnen leiden (zie verder) [45].

In koude gassen domineren echter over het algemeen de s-golfinteracties in plaats van de p-golfinteractie voor laag energetische onderscheidbare fermionische atomen. Deze onderscheidbare deeltjes komen in dit systeem overeen met atomen die een verschillende spin

hebben. Hierbij is voldaan aan het feit dat de globale golffunctie voor fermionsystemen oneven moet zijn, aangezien het spin deel oneven is en het ruimtelijk deel even. Als daarentegen ononderscheidbare atomen of atomen met dezelfde spin met elkaar verstrooien is s-golf verstrooiing niet meer mogelijk door het Pauli exclusie principe. Het spin deel is nu even, waardoor het ruimtelijk deel oneven moet worden (om te voldoen aan het Pauli exclusie principe). Het eerstvolgende kanaal waar dit geval is, is het p-golf kanaal [23].

Deze interactie hoeft echter niet in spin gepolariseerde gassen voor te komen, maar kan ook in twee-componentsystemen voorkomen door spintriplet interacties ($|\uparrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle, 2^{-1/2}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$) [45, 29], sommige van deze triplet paarvormingen komen ook voor in de superfluiditeit van ^3He . De Feshbach resonanties die overeenkomen met zowel de interacties tussen dezelfde als tussen verschillende spincomponenten zijn ook experimenteel waargenomen [45, 66]. De interactie kan ook voorkomen samen met s-golf [22, 67, 26] in gassen met twee (spin) componenten.

Eén van de grootste obstakels bij het creëren van Feshbach resonanties bij p-golf superfluida, zijn verliezen door inelastische botsingen. Om deze verliezen kleiner te maken kan er gewerkt worden in optische roosters, waarbij de interactiesterktes nog steeds kunnen getuned worden met Feshbach resonanties [63, 19]. Vanuit dit optisch rooster kunnen ook de optische Feshbach resonanties worden benaderd. Het opsluiten in een rooster zorgt er bovendien voor dat er een grotere controle is over de atoomdichtheid en de interactiepotentiaal [26].

Binnen deze p-golf superfluida zijn er verschillende belangrijke werken voor de algemene beschrijving van het systeem, er zijn er echter drie die het meeste hebben bijgedragen bij het schrijven van deze thesis. Eén van de belangrijkste hierbij is geschreven door Iskin [27], waar de evolutie van een driedimensionaal p-golf fermionisch gas is beschreven. Een tweede belangrijk werk voor deze thesis is geschreven door Botelho [9]. In dit artikel wordt de transitie voor een spin gepolariseerd gas besproken. Een derde belangrijke werk is geschreven door Ho [24], wat een paper is over de verstrooiing resonanties van een fermionisch gas met een algemeen angulair moment.

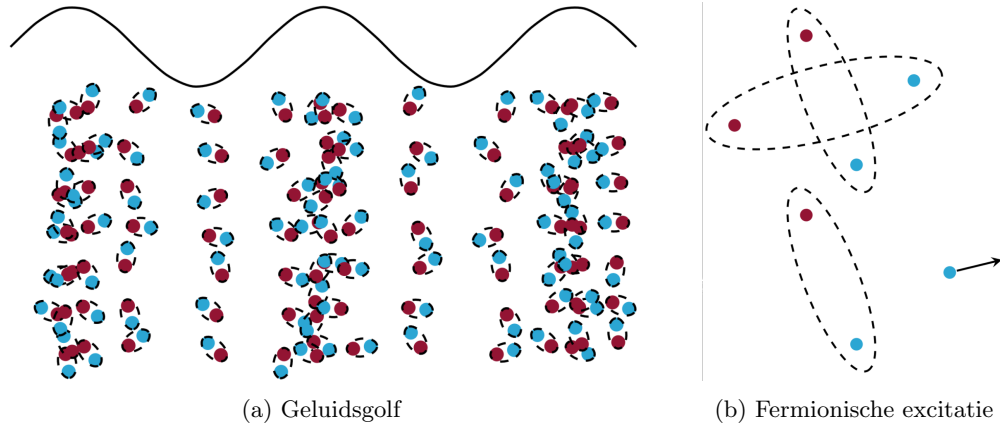
1.3 Collectieve excitaties in fermionische superfluida

Interagerende veeldeeltjes systemen kunnen naast de individuele excitaties van de deeltjes ook collectieve excitaties hebben. Een zeer gekend voorbeeld hiervan zijn roostertrillingen in kristalroosters, de collectieve excitaties komen overeen met fononen.

Collectieve excitaties van atomaire gassen en in het algemeen veeldeeltjes systemen, zijn zowel relevant voor experimentele als voor theoretische studies aangezien ze het responspectra van het systeem beschrijven [30, 31]. In atomaire gassen kunnen deze responsfuncties bijvoorbeeld worden bepaald met RF, Bragg [30] en roostermodulatie spectroscopie [59]. Dit kan worden gedaan door het systeem aan te drijven met een bepaald impuls $\vec{q}$ en de aandrijvingsfrequentie ω te variëren. Hieruit zullen dan resonantiebanden volgen die overeenkomen met de collectieve modes $\omega_{\vec{q}}$ van het systeem. Deze energiebanden zullen verbreed zijn door bijvoorbeeld interne koppelingen met andere elementaire excitaties die aanwezig kunnen zijn in het systeem. Deze koppeling kan zelfs zo sterk zijn dat de volledige resonantie kan verdwijnen [34].

In Fermi gassen zijn deze collectieve excitaties hoofdzakelijk bestudeerd voor s -golf interacties, de collectieve modes hiervan zullen hier nu ook kort worden besproken. Eén van de belangrijkste collectieve excitaties de Anderson-Bogoliubov (of Goldstone) tak. Deze tak [30] komt overeen met een geluidachtige (bosonische) tak voor lage impulsen ($\vec{q}$) maar vertoont hierna een complexer gedrag. De geluidachtige tak was origineel voorspeld door Anderson [3], wat ook later experimenteel was waargenomen [25] en uitgebreid naar de volledige Anderson-Bogoliubov tak. Deze tak is niet aanwezig in de standaard BCS theorie voor supergeleiding omdat daar wordt verondersteld dat alle paren bestaan uit fermionen met een tegengesteld impuls, waardoor de paren niet bewegen. Dit zorgt voor de sterkste koppeling tussen de paren, maar is niet de enige mogelijkheid (hier zal worden op ingegaan in hoofdstuk 4). Paren waar de impulsen niet exact tegengesteld zijn kunnen zich ook vormen, waardoor een geluidsgolf kan ontstaan die bestaat uit het collectief bewegen van Cooperparen. Dit is weergegeven in figuur 1.3a.

Een andere gespeculeerde mode is de paarexcitatie tak (of paarbrekings, Higgs of Andrianov-Popov tak) die zich in het paar excitatiespectrum bevindt en start op dezelfde positie als het spectrum [30, 34, 11]. Deze tak heeft een kwadratische dispersie en is zeer recent waargenomen door [16]. Het paar excitatiespectrum zelf komt overeen met het uiteenvallen van het paar naar twee individuele fermionen, dit is ook weergegeven in figuur 1.3b. Dit continuüm start in het BCS regime bij de bindingsenergie van de twee fermionen op 2Δ voor $\mu > 0$ en bij $2\sqrt{\mu^2 + |\Delta|^2}$ voor $\mu < 0$ (waar μ de chemische potentiaal is en Δ de ordeparameter is die ingevoerd wordt in hoofdstuk 3.) [45].



Figuur 1.3: De twee verschillende collectieve excitaties in fermionische superfluida. Figuur a komt overeen met de geluidsgolf van de Cooperparen, waarvan de dispersierelatie is gegeven door de Anderson-Bogoliubov tak. Figuur b, komt overeen met de fermionische excitatie wat op zijn beurt overeenkomt met het paar excitatiecontinuüm. Dit continuüm komt overeen met het opbreken van de Cooperparen. [62]

1.4 Doel en opbouw van de thesis

Het doel van deze thesis bestaat erin om de theorie ontwikkeld voor s -golf superfluida in [56] en d -golf superfluida in [52] uit te breiden naar p -golf superfluida, waaruit dan de responsfuncties kunnen worden berekend. In beide van deze theorieën wordt het fluïdum beschreven aan de hand van de Lagragiaanse kwantumveldentheorie. Daarom zal de thesis starten met een korte introductie van deze techniek in hoofdstuk 2. Hierna zal in hoofdstuk 3: Zadelpuntsbenadering, de actie van het systeem worden opgesteld, waarbij ook een effectieve potentiaal zal worden afgeleid. In dit hoofdstuk zal ook de vrije energie worden bepaald, waaruit een aantal belangrijke conclusies zullen worden gemaakt. Hierna zal in hoofdstuk 4: Gaussische fluctuaties, de zadelpuntsbenadering verbeterd worden door fluctuatievelden in te voeren. In hoofdstuk 5: Responsfuncties, zullen de responsfuncties en dus collectieve excitaties van het systeem worden bepaald. Hierbij zullen de resultaten ook worden vergeleken met een recente theoretische studie door Wang et al. [64], in dit artikel zijn andere technieken gebruikt om de responsfuncties terug te vinden. Ten slotte zal in hoofdstuk 6, een conclusie worden gegeven van de bekomen resultaten.

Hoofdstuk 2

Kwantumveldentheorie

Aangezien er in deze thesis zal worden gebruik gemaakt van de Lagrangiaanse kwantumveldentheorie, zal in dit hoofdstuk hierover een korte introductie worden gegeven. In het eerste deel van dit hoofdstuk zal de Grassmann algebra worden ingevoerd. Deze algebra kan worden gebruikt om fermionische velden te beschrijven. In het tweede deel van deze sectie worden padintegralen geïntroduceerd en in het laatste deel wordt de link gelegd met de thermodynamica. Heel dit hoofdstuk wordt beperkt tot de essentie en dient eerder als een korte samenvatting, een meer gedetailleerde uiteenzetting is terug te vinden in [55].

2.1 Grassmann algebra

De Grassmann algebra ($\mathbb{G}^n$) bestaat uit elementen (Grassmann variabelen) die anti-commuteren met elkaar. De algebra heeft een basis van n vectoren: $\{\eta_j \in \mathbb{G}^n\}_{j=1,\dots,n}$. Alle lineaire combinaties van deze elementen behoren eveneens tot de algebra: $c_0 + \sum_i c_i \eta_i \in \mathbb{G}^n$, waarbij alle c_i complexe getallen zijn. De vermenigvuldiging wordt zodanig gedefinieerd dat:

$$\forall \eta_a, \eta_b \in \mathbb{G}^n : \eta_a \eta_b = -\eta_b \eta_a. \quad (2.1)$$

Deze voorwaarde eist dat de Grassmann variabelen anti-commuteren. Verder zijn de functies van Grassmann variabelen gedefinieerd door hun Taylor ontwikkeling¹, maar aangezien dat $\eta_j^2 = -\eta_j^2 = 0$, beperken deze zich tot lineaire functies.

2.2 Padintegralen

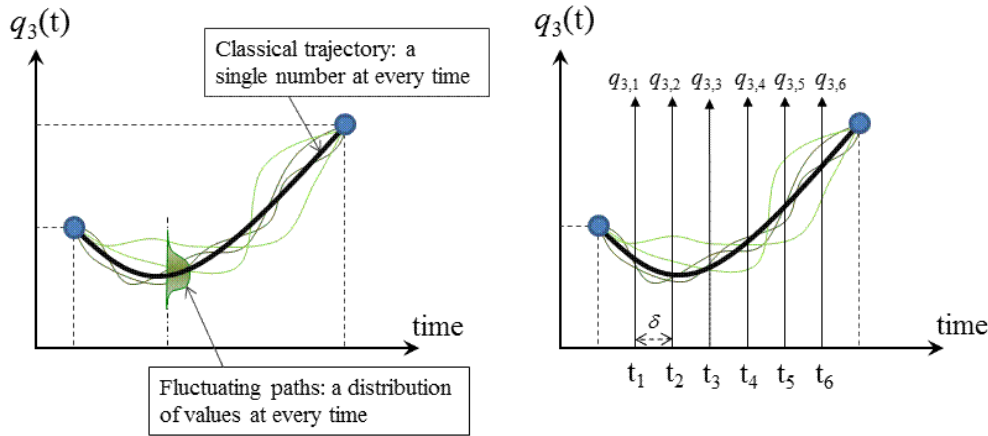
De eerstvolgende secties zullen zich beperken tot scalaire velden om de interpretatie eenvoudig te houden, hierna zal terug worden overgeschakeld op Grassmann velden. De Lagrangiaanse kwantummechanica en veldentheorie kan volledig onafhankelijk van het Hamiltoniaans formalisme worden opgesteld. De twee formalismen zijn echter wel equivalent². Het opstellen van deze Lagrangiaanse theorie berust op twee axioma's: Stel dat een deeltje van punt A naar punt B beweegt:

¹Hierbij is de afgeleide van een Grassmann variabele gedefinieerd als: $\partial_{\eta_j} \eta_l = \delta_{jl}$.

²Het padintegraal formalisme is in principe zelf sterker, omdat er meer vrijheid is in de keuze van een actie dan een Hamiltoniaan.

1. dan is de amplitudo om van punt A naar punt B te gaan, gelijk aan de som van de amplitudo's van alle mogelijke ononderscheidbaar paden,
2. waarbij met elk pad $x(t)$ een gewicht overeenkomt gelijk aan $\exp(iS[q(t)]/\hbar)$, waarbij $S[q(t)]$ de klassieke actie is.

Het effect van deze twee axioma's is grafisch weergegeven in figuur 2.1. In de klassieke mechanica geldt dat de actie van het gevolgde pad extremaal is. Dit zorgt er voor dat op eerste orde de actie constant is ($\delta S[q_{kl}] = 0$). Paden dicht bij dit klassieke pad zullen gelijkaardige acties hebben en hun gewicht/fase zal dus vergelijkbaar zijn: de paden interfereren constructief. Als er verder van het klassiek pad wordt afgeweken, zal de actie sneller variëren en zullen nabijgelegen paden een sterk verschillende fase hebben, gemiddeld gezien zullen deze paden elkaar uitdoven. Als $\hbar \rightarrow 0$, herleidt dit zich naar de klassieke mechanica waar wordt geëist dat $\delta S = 0$.



Figuur 2.1: Een schematische voorstelling van het padintegraal formalisme voor een pad $q_3(t)$ van een deeltje. De zwarte lijn komt overeen met het klassieke pad dat het deeltje zou volgen ($\delta S = 0$). In de kwantummechanica zijn er echter nog andere paden mogelijk die het deeltje kan volgen, wat wordt geïllustreerd met de grijze en groene lijnen. De belangrijkste paden bevinden zich dicht bij het klassieke pad, dit is aangeduid met de groene distributie. De rechtse figuur toont het discretiseren van de tijd [55].

De som over de verschillende paden kan worden uitgevoerd door de tijd te discretiseren, dit is weergegeven in figuur 2.1. De totale tijd (T) is opgedeeld in tijdstappen met lengte $\delta t = T/N$. De coördinaat van het deeltje op een tijdstap $t_i = i\delta t$ komt overeen met de coördinaat $q_{3,i} \equiv q_3(t_i)$, hierbij worden de initiële ($q_{3,0}$) en eindcoördinaat ($q_{3,N}$) vast gehouden. Sommeren over alle mogelijke paden van q_3 komt dan overeen met sommeren over alle mogelijke $q_{3,i}$ voor alle tijdstippen t_i , wat op zijn beurt overeenkomt met de coördinaat op ieder tijdstip te integreren van $-\infty$ tot $+\infty$. Om terug over te gaan naar continue tijd,

moet de limiet van $t \rightarrow \infty$ hiervan worden genomen:

$$\sum_{\text{paths}} \rightarrow \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dq_{3,1} \int_{-\infty}^{+\infty} dq_{3,1} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} dq_{3,N-1} = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dq_{3,j} \equiv \int \mathcal{D}q_3, \quad (2.2)$$

waarbij in de laatste stap de padintegraal is gedefinieerd. Samen met het tweede axioma levert dit de amplitudo om van $q_3(0)$ naar $q_3(T)$ te gaan:

$$K(q_{3,0}, 0 | q_{3,T}, T) = \int_{\{q_{3,0}, 0\}}^{\{q_{3,T}, T\}} \mathcal{D}q_3 \exp(iS[q(t)]/\hbar), \quad (2.3)$$

waarbij de propagator K is gedefinieerd, als de amplitudo om van $q_{3,0}$ op $t = 0$ te gaan naar $q_{3,T}$ op $t = T$.

Dit alles kan nu worden uitgebreid naar veldentheorie. In de klassieke veldentheorie komt met ieder punt en op ieder tijdstip een enkele waarde overeen. In kwantumveldentheorie is er een onbepaaldheid op deze waarden, die op dezelfde manier kan worden beschreven als bij de ééndeeltjes kwantummechanica. Nu is er echter in plaats van één coördinaat (q_3), die van $-\infty$ tot $+\infty$ kan variëren, een continuüm aan mogelijke coördinaten ($q(x)$ met x de continue coördinaat) die allen van $-\infty$ tot ∞ kunnen variëren. Dit kan behandeld worden door niet alleen de tijd te discretiseren maar ook de continue coördinaat x , dit is grafisch weergegeven in figuur 2.2. De tijd wordt nog steeds gediscrètiseerd in stappen $\delta t = T/N$ en de coördinaat x in stappen van $\delta x = L/M$. Dit vormt een rooster van coördinaten $q_{\{i,j\}}$, die allen van $-\infty$ tot ∞ kunnen variëren. De padintegraal kan dan op analoge wijze worden gedefinieerd als hiervoor:

$$\sum_{\text{field realizations}} \rightarrow \lim_{N, M \rightarrow \infty} \prod_{i=0}^M \prod_{j=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dq_{i,j} \equiv \int \mathcal{D}q. \quad (2.4)$$

Om duidelijk te maken dat het over velden gaat in plaats van enkele coördinaten, wordt overgegaan van q naar ϕ .

Opnieuw is de amplitudo die overeenkomt met een bepaalde veldconfiguratie gelijk aan:

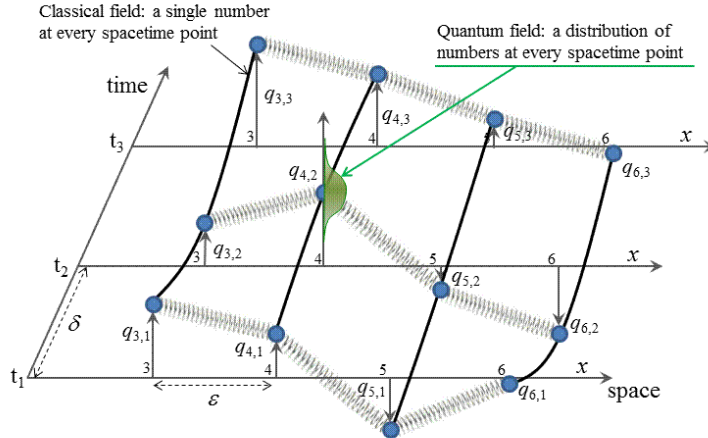
$$\exp\left(\frac{i}{\hbar} S[\phi]\right) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_V \mathcal{L}(\phi, \partial_\mu \phi) d^4x\right), \quad (2.5)$$

waarbij nu de actie expliciet is uitgeschreven in termen van de Lagragiaanse dichtheid ($\mathcal{L}$) die afhankelijk is van het veld en de afgeleide van het veld. De integraal is over een volume in ruimte-tijd. De propagator kan nu geschreven worden om van een veldconfiguratie ϕ_a naar een veldconfiguratie ϕ_b te gaan op een tijd T als:

$$K(\phi_a, 0 | \phi_b, T) = \int_{\{\phi_a, 0\}}^{\{\phi_b, T\}} \mathcal{D}\phi \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S[\phi]\right\}. \quad (2.6)$$

Het zal echter nuttiger blijken om in plaats van de propagator te berekenen, de specifieke amplitudo te berekenen die overeenkomt met de kans dat startend van een veld, een tijd T later het veld zich opnieuw in de dezelfde toestand bevindt, en dat te doen voor alle mogelijke velden. Dit komt overeen met:

$$Z = \int \mathcal{D}\phi \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S[\phi]\right\}. \quad (2.7)$$



Figuur 2.2: De gediscretiseerde versie van het veld $q_{x,t}$. De zwarte lijnen komen overeen met het klassieke pad dat ieder punt zou volgen in de klassieke veldentheorie. In de kwantummechanische veldentheorie zijn er echter nog andere paden mogelijk die het deeltje kan volgen, de belangrijkste paden bevinden zich dicht bij het klassieke pad, dit is aangeduid met de groene distributie[55].

Indien er geen randvoorwaarden bij de integraal staan, dan wordt er gebruik gemaakt van periodische randvoorwaarden. Om verwachtingswaarden van grootheden te bepalen kunnen padintegralen eveneens worden gebruikt. Een grootheid moet dan worden uitgemiddeld over het ganse pad. Intuïtief is het dan direct duidelijk dat de verwachtingswaarde van een grootheid A gelijk is aan:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\phi A[\phi] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S[\phi] \right\}. \quad (2.8)$$

2.3 De partitiefunctie

De propagator met periodische randvoorwaarden (vgl. (2.7)) kan worden geassocieerd met de toestandssom “ Z ”. Uit deze grootheid kunnen alle andere thermodynamische grootheden worden afgeleid. De propagator kan geschreven worden als [43]:

$$\int \mathcal{D}\phi \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S[\phi] \right\} \equiv \int \langle \phi | e^{i \int_0^T dt \hat{H}(t) \hbar} | \phi \rangle d\phi = \int \langle \phi | e^{i \hat{H}T/\hbar} | \phi \rangle d\phi \quad (2.9)$$

De propagator in het eerste lid is geschreven in termen van de Lagrangiaanse kwantumveldentheorie. Maar zoals vermeld, is deze theorie equivalent aan de Hamiltoniaanse kwantumveldentheorie en kan de propagator dus worden geschreven in termen van de Hamiltoniaan, dit is gegeven in het tweede lid. Hierbij wordt de tijdsevolutie van een eigentoestand van de Hilbert ruimte uitgerekend door te vermenigvuldigen met de tijdsevolutie-operator en vervolgens terug geprojecteerd op zichzelf. Dit levert de amplitudo dat het systeem zich startend van een toestand $|\phi\rangle$, een tijd T later zich terug in dezelfde toestand $|\phi\rangle$ bevindt. De integraal zorgt er voor dat elke mogelijke toestand mee in rekening wordt gebracht. In

de laatste stap is tenslotte verondersteld dat de Hamiltoniaan tijdsonafhankelijk is. Deze laatste twee termen zijn niets anders dan het spoor over de tijdsevolutie-operator:

$$\int \mathcal{D}\phi \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S[\phi]\right\} = \text{Tr} \left(e^{i\hat{H}T/\hbar} \right). \quad (2.10)$$

Anderzijds is de toestandssom gelijk aan het spoor van dichtheidsmatrix of

$$Z = \text{Tr}(\hat{\rho}) = \text{Tr} \left(e^{-\beta\hat{H}} \right). \quad (2.11)$$

Deze uitdrukking is zeer gelijkaardig aan vgl. (2.10). Hieruit volgt dat als in vgl. (2.10) wordt overgegaan naar de imaginaire tijd $t \rightarrow -i\tau$ en eindtijd $T \rightarrow \beta\hbar$ dezelfde uitdrukking kan worden bekomen en dus:

$$\begin{aligned} & \int_{\phi(\vec{x},0)=\pm\phi(\vec{x},T)} \mathcal{D}\phi \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt \mathcal{L}(t)\right\} \\ & \xrightarrow[(T \rightarrow \hbar\beta)]{t \rightarrow -i\tau} \int_{\phi(\vec{x},0)=\pm\phi(\vec{x},\hbar\beta)} \mathcal{D}\phi \exp\left\{-\frac{1}{\hbar} \left(- \int_0^{\hbar\beta} d\tau \mathcal{L}(t \rightarrow -i\tau) \right)\right\}, \end{aligned} \quad (2.12)$$

waarbij de term tussen haakjes overeenkomt met de euclidische actie $S_E[\phi]$. De toestandssom kan dan worden geschreven als

$$Z = \int \mathcal{D}\phi \exp\left\{-\frac{1}{\hbar} S_E[\phi]\right\}. \quad (2.13)$$

De toestandssom is ook eenvoudig uit te drukken in termen van de vrije energie (F), met de standaard formule:

$$Z = \exp\{-\beta F(T, V, \mu)\}, \quad (2.14)$$

waarbij T de temperatuur is, V het volume en μ een chemische potentiaal. In vgl. (2.8) is uitgedrukt hoe verwachtingswaarden kunnen worden uitgerekend bij padintegralen met reële tijden. Dit kan echter direct worden doorgevoerd naar complexe tijden tot:

$$\langle\langle A \rangle\rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\phi A[\phi] \exp\{-S_E[\phi]\}. \quad (2.15)$$

Hierbij is nu de notatie $\langle\langle A \rangle\rangle$ gebruikt aangezien de uitmiddeling nu ook de thermodynamica van het systeem mee in rekening zal brengen. Dit is duidelijk uit vgl. (2.11), waaruit volgt dat de uitmiddeling equivalent is aan $Z^{-1} \text{Tr}[\hat{A}\hat{\rho}]$.

2.4 Fermionische padintegralen

Tot nu toe heeft deze inleiding in padintegralen zich beperkt tot een reëel veld ϕ . Dit hoeft echter niet het geval te zijn en de theorie kan eenvoudig worden uitgebreid naar complexe velden. Dit zorgt ervoor dat er een extra vrijheidsgraad is, waardoor ook de paden moeten worden gesommeerd over deze extra vrijheidsgraden, dit komt overeen met:

$$\int \mathcal{D}\phi \rightarrow \int \mathcal{D}\phi^\dagger \int \mathcal{D}\phi. \quad (2.16)$$

Dit type velden zal verder in de thesis worden gebruikt om bosonen te beschrijven. Fermionische velden daarentegen moeten met Grassmann variabelen (zie sectie 2.1) worden beschreven. Dit zorgt er voor dat als twee fermionen van plaats worden verwisseld, dit resulteert in een globaal minteken. Dit is exact hetzelfde principe als bij fermionische creatie en annihilatie operatoren of veldoperatoren³. Deze Grassmann velden hebben echter nog steeds twee interne vrijheidsgraden en moeten dus net zoals bij complexe velden beschreven worden met:

$$\int \mathcal{D}\phi \rightarrow \int \mathcal{D}\bar{\phi} \int \mathcal{D}\phi. \quad (2.17)$$

Zoals de conventie die hiervoor was aangenomen komen de integraaltekenen zonder grenzen overeen met periodische randvoorwaarden. Nu in het geval van bosonen is dit nog steeds het geval en zijn de randvoorwaarden dus: $\phi(x, 0) = \phi(x, \hbar\beta)$. Bij fermionen is dit niet langer het geval door de symmetrieën van de Grassmann variabelen, de nieuwe randvoorwaarden zijn: $\phi(x, 0) = -\phi(x, \hbar\beta)$.

Het enige type padintegralen dat analytisch kan worden opgelost zijn Gaussische padintegralen, deze hebben als algemene oplossing voor fermionen: Dit kan uitgebreid worden naar padintegralen, met een willekeurige of zelfs oneindige hoeveelheid toestanden tot:

$$\int \mathcal{D}\bar{\phi} \int \mathcal{D}\phi \exp \left\{ - \sum_{i,j} \bar{\phi}_i A_{i,j} \phi_j \right\} = \det A. \quad (2.18)$$

De uitdrukking voor bosonen is zeer gelijkaardig en wordt ter informatie ook gegeven:

$$\int \mathcal{D}\phi^\dagger \int \mathcal{D}\phi \exp \left\{ - \sum_{i,j} \phi_i^\dagger A_{i,j} \phi_j \right\} = (\det A)^{-1}. \quad (2.19)$$

Merk hierbij op dat vaak $\phi^\dagger$ eveneens wordt geschreven als $\bar{\phi}$.

2.5 Van Hamiltoniaan naar padintegraal

Zoals in sectie 2.3 aangehaald, komt de propagator $K(\phi_a, 0 | \phi_b, T)$ in vgl. (2.6) overeen met de amplitudo om startend van het veld ϕ_a te propageren naar het veld ϕ_b op tijd T . Dit kan ook geschreven worden met de Hamiltoniaan als:

$$K(\phi_a, 0 | \phi_b, T) = \langle \phi_b | e^{-i\hat{H}T/\hbar} | \phi_a \rangle. \quad (2.20)$$

Door de Hamiltoniaan hierin in te vullen en gebruik te maken van de coherente toestanden⁴, kan hieruit het padintegraal formalisme worden afgeleid. Deze afleiding volledig correct uitwerken is echter niet triviaal voor fermionische velden. De afleiding kan echter wel worden teruggevonden in [13, 20]. In de plaats daarvan kan het resultaat wel beargumenteerd worden vanuit de klassieke veldentheorie, die tot hetzelfde resultaat komt. In de klassieke veldentheorie is de Lagrangiaanse dichtheid eenvoudig te transformeren naar de Hamiltoniaanse dichtheid door een Legendre transformatie:

$$\mathcal{H} = \pi \frac{\partial}{\partial t} \phi - \mathcal{L}(\phi, \nabla \phi), \quad (2.21)$$

³In het padintegraal formalisme moet ook de (anti-)communicatie relaties niet in rekening worden gebracht.

⁴Dit zijn de eigentoestand van de creatie en annihilatie operatoren in het Hamiltoniaans formalisme.

waarbij de canonische impuls is gedefinieerd als:

$$\pi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial\phi/\partial t)}. \quad (2.22)$$

In de kwantumveldentheorie voor fermionen, worden de variabelen⁵ $\pi = \hbar\bar{\phi}$ en wordt de Hamiltoniaanse dichtheid dus ook vaak uitgedrukt als $\mathcal{H}(\phi, \bar{\phi})$. Hierbij zijn in de Hamiltoniaanse dichtheid alle veldoperatoren vervangen door de velden en zijn de $\bar{\phi}$ uiterst links geplaatst en ϕ uiterst rechts. De Lagrangiaanse dichtheid is op zijn beurt ook meestal alleen afhankelijk van ϕ en $\bar{\phi}$. Dit maakt dat de overgang kan geschreven worden als

$$\mathcal{L}(\phi, \bar{\phi}) = \hbar\bar{\phi}\frac{\partial}{\partial t}\phi - \mathcal{H}(\phi, \bar{\phi}). \quad (2.23)$$

⁵Verder in de thesis zal duidelijk worden dat dit effectief het geval is.

Hoofdstuk 3

Zadelpuntsbenadering

3.1 Inleiding

In dit hoofdstuk zal de vrije energie worden bepaald van het systeem. Deze afleiding zal gelijkaardig zijn aan de afleiding in [57], waar deze afleiding is gemaakt voor s-golf superfluïda. Deze superfluïda kunnen worden beschreven door een contactpotentiaal: $g\delta(\vec{x} - \vec{x}')$. Dit is voor p-golf superfluïda niet het geval, wat de berekeningen zal compliceren. Deze berekening is ook reeds gemaakt voor d-golf superfluïda [52], waarbij een relatief gelijkaardige potentiaal is gebruikt.

Het hoofdstuk zal starten met het opstellen van de actie vanuit de Hamiltoniaan, waaruit dan de toestandssom zal worden bepaald. Hieruit zal dan de vrije energie van het systeem worden afgeleid met een zadelpuntsbenadering.

3.2 Opstellen van de Euclidische actie

Aangezien de interpretatie van de Lagragiaan op het eerste zicht moeilijker is dan dat van de Hamiltoniaan, zal deze afleiding hieruit starten. In tweede kwantisatie kan een veeldeeltjes Hamiltoniaan worden geschreven in functie van de ééndeeltjes kinetische energie ($T(\vec{r})$), de ééndeeltjes potentiaal ($V_{ext}(\vec{r})$), de chemische potentiaal en de tweedeeltjes potentiaal ($V(\vec{r}, \vec{r}')$) [54]:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_I \quad (3.1)$$

met

$$\hat{H}_0 = \int d\vec{r} \sum_{\sigma} \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) [T(\vec{r}) + V_{ext}(\vec{r}) - \mu_{\sigma}] \hat{\psi}_{\sigma}(\vec{r}) \quad (3.2)$$

en

$$\hat{H}_I = \int d\vec{r} \int d\vec{r}' \hat{\psi}_{\uparrow}^{\dagger}(\vec{r}) \hat{\psi}_{\downarrow}^{\dagger}(\vec{r}') V(\vec{r} - \vec{r}') \hat{\psi}_{\downarrow}(\vec{r}') \hat{\psi}_{\uparrow}(\vec{r}), \quad (3.3)$$

hierbij is H_0 het niet-interagerende deel van de Hamiltoniaan en H_I het interagerende deel van de Hamiltoniaan. $\hat{\psi}(\vec{r})$ en $\hat{\psi}^{\dagger}(\vec{r})$ zijn veldoperatoren, die respectievelijk een deeltje creëren en vernietigen op positie $\vec{r}$. In de Hamiltoniaan wordt niet alleen geïntegreerd over de ruimte ($\vec{r}$) maar wordt ook gesommeerd over de spintoestand, in deze thesis zijn er alleen spin-op of spin-neer atomen. In deze Hamiltoniaan is er ook al een chemische potentiaal

(μ_σ) toegevoegd om het aantal deeltjes vast te leggen voor zowel de spin-op als de spin-neer fermionen, wat verder expliciet wordt aangetoond. Aangezien deze thesis over fermionen gaat, zijn deze operatoren Grassmann variabelen (zie sectie 2.1)¹. Het niet-interagerende deel van de Hamiltoniaan (H_0) is zeer eenvoudig aangezien er geen ééndeeltjes potentiaal is:

$$\hat{H}_0 = \int d\vec{r} \sum_{\sigma} \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \mu_{\sigma} \right] \hat{\psi}_{\sigma}(\vec{r}). \quad (3.4)$$

De interactiepotentiaal $\hat{H}_I$ zal voorlopig niet expliciet worden uitgewerkt. Om nu over te gaan naar de Lagragiaan kan de formule gegeven in (2.23) worden gebruikt:

$$L(\bar{\psi}_{\sigma}(\vec{r}, t), \psi_{\sigma}(\vec{r}, t)) = \int i\hbar \bar{\psi}_{\sigma}(\vec{r}, t) \frac{\partial}{\partial t} \psi_{\sigma}(\vec{r}, t) d\vec{r} - H(\bar{\psi}_{\sigma}(\vec{r}, t), \psi_{\sigma}(\vec{r}, t)), \quad (3.5)$$

hierbij is $H(\bar{\psi}_{\sigma}(\vec{r}, t), \psi_{\sigma}(\vec{r}, t))$ de Hamiltonian in dezelfde vorm dan hiervoor, maar met de creatie ($\hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}, t)$) en annihilatie operator ($\hat{\psi}_{\sigma}(\vec{r}, t)$), respectievelijk vervangen door de Grassmann-velden $\bar{\psi}_{\sigma}(\vec{r}, t)$ en $\psi_{\sigma}(\vec{r}, t)$. Dit maakt dat de actie geschreven kan worden met:

$$S(\bar{\psi}_{\sigma}(\vec{r}, t), \psi_{\sigma}(\vec{r}, t)) = \int_0^T L(\bar{\psi}_{\sigma}(\vec{r}, t), \psi_{\sigma}(\vec{r}, t)) dt, \quad (3.6)$$

wat met vgl. (3.1), (3.3), (3.4) en uiteraard vgl. (3.5) volledig kan worden geschreven als:

$$\begin{aligned} S(\bar{\psi}_{\sigma}(\vec{r}, t), \psi_{\sigma}(\vec{r}, t)) = & \int_0^T dt \int_V d\vec{r} \sum_{\sigma} \left[\bar{\psi}_{\sigma}(\vec{r}, t) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \mu_{\sigma} \right) \psi_{\sigma}(\vec{r}, t) \right] \\ & - \int_0^T dt \int_{V_r} d\vec{r} \int_{V'_r} d\vec{r}' \left[\bar{\psi}_{\uparrow}^{\dagger}(\vec{r}, t) \bar{\psi}_{\downarrow}^{\dagger}(\vec{r}', t) V_2(\vec{r} - \vec{r}') \psi_{\downarrow}(\vec{r}', t) \psi_{\uparrow}(\vec{r}, t) \right]. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Om de toestandssom te berekenen moet eerst de euclidische actie (S_E) worden berekend, de definitie is gegeven in vgl. (2.13), dit komt neer op de substituties $t \rightarrow i\tau$ en $T \rightarrow \hbar\beta$ door te voeren in de actie S en dan $S_E = -iS$ uit te rekenen:

$$\begin{aligned} S_E(\bar{\psi}_{\sigma}(\vec{r}, \tau), \psi_{\sigma}(\vec{r}, \tau)) = & \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_V d\vec{r} \sum_{\sigma} \left[\bar{\psi}_{\sigma}(\vec{r}, \tau) \left(\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \mu_{\sigma} \right) \psi_{\sigma}(\vec{r}, \tau) \right] \\ & + \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_{V_r} d\vec{r} \int_{V'_r} d\vec{r}' \left[\bar{\psi}_{\uparrow}^{\dagger}(\vec{r}, \tau) \bar{\psi}_{\downarrow}^{\dagger}(\vec{r}', \tau) V_2(\vec{r} - \vec{r}') \psi_{\downarrow}(\vec{r}', \tau) \psi_{\uparrow}(\vec{r}, \tau) \right]. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Om de notatie en berekeningen te vereenvoudigen zal worden overgaan naar natuurlijke eenheden van het Fermi-golfgetal (k_F) en de Fermi-energie (E_F). Aangezien hier gewerkt wordt met twee spin varianten in een driedimensionaal systeem, wordt de Fermi energie $[3\pi^2(n_{\downarrow} + n_{\uparrow})]^{1/3}$. Verder wordt $\omega_F = E_F/\hbar$ gebruikt als de eenheid van frequentie en de Fermi-temperatuur $T_F = E_F/k_B$ als eenheid van temperatuur. Dit komt neer op $\hbar, 2m, k_F$ en k_B gelijkstellen aan één. Rekeninghoudend met dat de actie eenheden heeft van $\hbar$ en de velden eenheden van $V^{-1/2}$ (waarbij V de eenheid van volume is) kan de actie herschreven

¹Dit is niets nieuw, maar wordt zelden zo expliciet vermeld.

worden naar de nieuwe eenheden $\vec{r} = \vec{r} k_F$ en $\tilde{\tau} = E_F \tau / \hbar$:

$$S_E = \int_0^{T_F/T} \frac{\hbar d\tilde{\tau}}{E_F} \int \frac{d\vec{r}}{k_F^3} \sum_{\sigma} \left[\bar{\psi}_{\sigma}(\vec{r}, \tilde{\tau}) \left(E_F \frac{\partial}{\partial \tilde{\tau}} - \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \nabla^2 - \mu_{\sigma} \right) \psi_{\sigma}(\vec{r}, \tilde{\tau}) \right] \\ + \int_0^{T_F/T} \frac{\hbar d\tilde{\tau}}{E_F} \int \frac{d\vec{r}}{k_F^3} \int \frac{d\vec{r}'}{k_F^3} \left[\bar{\psi}_{\uparrow}(\vec{r}, \tilde{\tau}) \bar{\psi}_{\downarrow}(\vec{r}', \tilde{\tau}) V_2(\vec{r} - \vec{r}') \psi_{\downarrow}(\vec{r}', \tilde{\tau}) \psi_{\uparrow}(\vec{r}, \tilde{\tau}) \right] \quad (3.9)$$

Gebruikmakend van de dimensieloze versie van de grootheden $\tilde{S}_E = S_E/\hbar$, $\tilde{V}_2 = V_2/E_F$, $\tilde{\psi} = \psi/(k_F)^{3/2}$, kan dit volledig dimensieloos worden geschreven als:

$$S_E = \int_0^{\beta} d\tau \int d\vec{r} \sum_{\sigma} \left[\bar{\psi}_{\sigma}(\vec{r}, \tau) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \nabla^2 - \mu_{\sigma} \right) \psi_{\sigma}(\vec{r}, \tau) \right] \\ + \int_0^{\beta} d\tau \int d\vec{r} \int d\vec{r}' \left[\bar{\psi}_{\uparrow}(\vec{r}, \tau) \bar{\psi}_{\downarrow}(\vec{r}', \tau) V_2(\vec{r} - \vec{r}') \psi_{\downarrow}(\vec{r}', \tau) \psi_{\uparrow}(\vec{r}, \tau) \right], \quad (3.10)$$

hierbij zijn alle tildes weggelaten. Nu aangezien de tweedeeltjes potentiaal, alleen gekend is in de Fourierruimte (k -ruimte) zal heel de actie Fouriergetransformeerd worden.

3.3 Fouriertransformatie van de Euclidische actie

Naast de transformatie naar de k -ruimte voor de potentiaal zal ook de complexe tijd in één keer worden Fouriergetransformeerd naar de Matsubara frequenties $\omega_n = (2n+1)\pi/\beta$ voor fermionen, later zal ook blijken dat de bosonische Matsubara frequenties ($\varpi_n = 2n\pi/\beta$) relevant zullen zijn². Beide transformaties zijn, afgezien van de tweedeeltjes potentiaal, ook noodzakelijk in latere berekeningen. De Fouriertransformatie van de velden is gedefinieerd als:

$$\psi_{\sigma}(\vec{r}, \tau) = \frac{1}{\sqrt{\beta V}} \sum_n \sum_{\vec{k}} e^{-i\omega_n \tau + i\vec{k} \cdot \vec{r}} \psi_{\sigma}(\vec{k}, n) \quad (3.11)$$

en

$$\bar{\psi}_{\sigma}(\vec{r}, \tau) = \frac{1}{\sqrt{\beta V}} \sum_n \sum_{\vec{k}} e^{i\omega_n \tau - i\vec{k} \cdot \vec{r}} \bar{\psi}_{\sigma}(\vec{k}, n). \quad (3.12)$$

De vorm van de tweede transformatie is duidelijk uit de relatie $\bar{\psi} = \psi^{\dagger}$. Een andere belangrijke uitdrukking is:

$$\int_0^{\beta} d\tau \int d\vec{r} \exp \left\{ -i(\omega_{n'} - \omega_n) \tau + i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{r} \right\} = V \beta \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \delta_{nn'}. \quad (3.13)$$

Dit kan nu worden toegepast op alle termen van de euclidische actie (vgl. (3.10)). De actie bestaat uit twee delen, het niet-interagerende deel S_0 en het interactie deel S_I . Het

²Matsubara frequenties/sommaties zijn niet anders dan normale Fourierreeks. Een functie (bv. een veld) die periodisch is op het interval $[0, \beta]$ (wat overeenkomt met de periodische randvoorwaarden die we op de complexe tijd eisen voor bosonen: $\psi(\tau = 0) = \psi(\tau = \beta)$ (zie sectie 2.4)) kan ontwikkeld worden in een Fourierreeks met frequenties $\varpi_n = 2\pi n/\beta$. Functies die anti-periodisch zijn (en dus $\psi(\tau = 0) = -\psi(\tau = \beta)$ wat overeenkomt met fermionen), kunnen ontwikkeld worden in de frequenties met $\omega_n = (2n+1)\pi/\beta$.

niet-intragerende deel zal eerst worden getransformeerd:

$$\begin{aligned}
S_0 &= \int_0^\beta d\tau \int d\vec{r} \bar{\psi}_{\vec{r},\tau,\sigma} \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \nabla_{\vec{x}}^2 - \mu_\sigma \right) \psi_{\vec{x},\tau,\sigma} = \int_0^\beta d\tau \int d\vec{r} \bar{\psi}_{\vec{r},\tau,\sigma} \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \nabla_{\vec{x}}^2 - \mu_\sigma \right) \psi_{\vec{x},\tau,\sigma} \\
&= \sum_{\vec{k},n} \sum_{\vec{k}',n'} \frac{1}{\beta V} \int_0^\beta d\tau \int d\vec{r} \left(e^{i\omega_n \tau - i\vec{k} \cdot \vec{r}} \bar{\psi}_{\vec{k},n,\sigma} \right) \left(-i\omega_{n'} + (k')^2 - \mu_\sigma \right) \left(e^{-i\omega_{n'} \tau + i\vec{k}' \cdot \vec{r}} \psi_{\vec{k}',n',\sigma} \right) \\
&= \sum_{\vec{k},n} (-i\omega_n + k^2 - \mu_\sigma) \bar{\psi}_{\vec{k},n,\sigma} \psi_{\vec{k},n,\sigma}.
\end{aligned} \tag{3.14}$$

Het interactie-deel transformeren eist iets meer aandacht:

$$\begin{aligned}
S_I &= \int_0^\beta d\tau \int d\vec{r} \int d\vec{r}' \bar{\psi}_\uparrow(\vec{r}, \tau) \bar{\psi}_\downarrow(\vec{r}', \tau) V_2(\vec{r} - \vec{r}') \psi_\downarrow(\vec{r}', \tau) \psi_\uparrow(\vec{r}, \tau) \\
&= \frac{1}{(\beta V)^2} \sum_{\vec{k}_1, n_1} \sum_{\vec{k}_2, n_2} \sum_{\vec{k}_3, n_3} \sum_{\vec{k}_4, n_4} \int_0^\beta d\tau \int d\vec{r} \int d\vec{r}' \left(e^{i\omega_{n_1} \tau - i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}} \bar{\psi}_{\vec{k}_1, n_1, \uparrow} \right) \left(e^{i\omega_{n_2} \tau' - i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}'} \bar{\psi}_{\vec{k}_2, n_2, \uparrow} \right) \\
&\quad \times V_2(\vec{r} - \vec{r}') \left(e^{-i\omega_{n_3} \tau + i\vec{k}_3 \cdot \vec{r}'} \psi_{\vec{k}_3, n_3, \uparrow} \right) \left(e^{-i\omega_{n_4} \tau + i\vec{k}_4 \cdot \vec{r}} \psi_{\vec{k}_4, n_4, \uparrow} \right).
\end{aligned} \tag{3.15}$$

Overgaan naar de nieuwe integratie variabelen $\vec{u} = \vec{r} - \vec{r}'$ en $\vec{u}' = \vec{r}'$ en alle sommatie schrijven in één sommatieteken levert:

$$\begin{aligned}
S_I &= \frac{1}{\beta V} \sum_{\{\vec{k}_i, n_i\}} \int_0^\beta d\tau \int \frac{d\vec{u}'}{\beta V} \exp \left\{ -i(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}_3 - \vec{k}_4) \cdot \vec{u}' + i(-\omega_1 - \omega_2 + \omega_3 + \omega_4)\tau \right\} \\
&\quad \times \bar{\psi}_{\vec{k}_1, n_1, \uparrow} \bar{\psi}_{\vec{k}_2, n_2, \uparrow} \left[\int d\vec{u} V(\vec{u}) \exp \left\{ -i(\vec{k}_1 - \vec{k}_4) \cdot \vec{u} \right\} \right] \psi_{\vec{k}_3, n_3, \uparrow} \psi_{\vec{k}_4, n_4, \uparrow}.
\end{aligned} \tag{3.16}$$

De integraal tussen vierkante haakjes kan worden geschreven als $\tilde{V}(\vec{k}_1, \vec{k}_4)$. Hierbij is nog een tilde geschreven omdat de tweedeeltjes potentiaal zal gedefinieerd worden voor impulsen die relatief zijn aan het massacentrum. De effectieve potentiaal zal afgeleid worden in de volgende sectie. In principe kan $\tilde{V}(\vec{k}_1, \vec{k}_4)$ ook worden geschreven als $\tilde{V}(\vec{k}_1 - \vec{k}_4)$, wat impliceert dat alleen de relatieve impulsen hier relevant zijn. Gebruikmakend van vgl. (3.13), herleidt de eerste integraal zich tot $\delta_{\vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}_3 - \vec{k}_4} \delta_{n_1 + n_2 - n_3 - n_4}$. Dit levert dan de uiteindelijke actie:

$$S_I = \frac{1}{\beta V} \sum_{\vec{k}_2, n_2} \sum_{\vec{k}_3, n_3} \sum_{\vec{k}_4, n_4} \bar{\psi}_{\vec{k}_3 + \vec{k}_4 - \vec{k}_2, n_3 + n_4 - n_2, \uparrow} \bar{\psi}_{\vec{k}_2, n_2, \uparrow} \tilde{V}(\vec{k}_1, \vec{k}_4) \psi_{\vec{k}_3, n_3, \uparrow} \psi_{\vec{k}_4, n_4, \uparrow}. \tag{3.17}$$

Dit kan worden geschreven als:

$$\begin{aligned}
S_I &= \frac{1}{\beta V} \sum_{\vec{q}, m} \sum_{\vec{k}, n} \sum_{\vec{k}', n'} \bar{\psi}_{\vec{q}/2 + \vec{k}, m/2 + n, \sigma} \bar{\psi}_{\vec{q}/2 - \vec{k}, m/2 - n, \sigma} V(\vec{k}, \vec{k}') \\
&\quad \times \psi_{\vec{q}/2 - \vec{k}', m/2 - n', \sigma} \psi_{\vec{q}/2 + \vec{k}', m/2 + n', \sigma}.
\end{aligned} \tag{3.18}$$

De impuls $\vec{q}$ en de Matsubara frequentie m , zal explicieter gedefinieerd zijn en een duidelijke fysische betekenis krijgen in de sectie 3.5. Ze zijn de impuls en frequentie die overeenkomen met het massacentrum. De Euclidische actie ($S_E = S_0 + S_I$) is nu bijna volledig bepaald met vlg. (3.14) en (3.18). Alleen de interactiepotentiaal moet nog worden bepaald, wat het onderwerp is van de volgende sectie. Als er vanaf hier wordt gesproken over de actie, refereert die naar de Euclidische actie.

3.4 p-golf potentiaal

In deze sectie zal de effectieve potentiaal voor p-golf interacties worden afgeleid. Een effectieve potentiaal veroorzaakt exact hetzelfde gedrag als de echte fysische potentiaal, maar is veel handelbaarder en kan eenvoudig worden teruggevonden. De effectieve potentiaal zal variabelen bevatten die niet overeenkomen met fysische observabelen. Deze variabelen kunnen echter wel gelinkt worden aan observabelen. Het meest gekende voorbeeld hiervan is de contactpotentiaal bij s-golf verstrooiing: $g\delta(x - y)$, waarbij de g kan worden gelinkt aan de verstrooiingslengte a . De uitdrukking voor p-golf verstrooiing is echter moeilijk en nu zijn er ook twee fysische grootheden die het gedrag van de potentiaal bepalen: het verstrooiingsvolume en de effectieve interactielengte.

3.4.1 Afleiding effectieve potentiaal

De afleiding van de effectieve potentiaal is gelijkaardig aan de afleiding voor het tweedimensionale geval in [9]. Zoals besproken komt de potentiaal in de k -ruimte overeen met:

$$V(\vec{k}, \vec{k}') = \int_0^\infty u^2 du \int_\Omega d\Omega_u V(u) \exp\left\{-i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{u}\right\}. \quad (3.19)$$

De term is ook in één keer omgeschreven naar bolcoördinaten omdat de potentiaal alleen afhankelijk is van de grootte van $\vec{u}$. Deze potentiaal kan worden gesplitst in verschillende termen voor ieder angulair momentum, door gebruik te maken van de Jacobi-Anger reeks [10, 42]:

$$e^{i\vec{k} \cdot \vec{u}} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(ku) P_l\left(\frac{\vec{k} \cdot \vec{u}}{kr}\right), \quad (3.20)$$

waarbij k en u de grootte zijn van de vectoren $\vec{k}$ en $\vec{u}$, j_l de sferische Besselfuncties van orde l zijn en P_l Legendre polynomen van orden l . De Legendre polynomen kunnen worden herschreven met het additietheorema voor bolfuncties [10]:

$$P_l\left(\frac{\vec{k} \cdot \vec{u}}{kr}\right) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\Omega_k) Y_{lm}^*(\Omega_u), \quad (3.21)$$

waarbij Y_{lm} bolfuncties zijn. De potentiaal kan nu verder worden herschreven door vgl. (3.21) en vgl. (3.20) te substitueren in vgl. (3.19):

$$V(\vec{k}, \vec{k}') = (4\pi)^2 \sum_{\{l,m\}} \sum_{\{l',m'\}} \int_0^\infty u^2 du \int_\Omega d\Omega_u (-i)^l j_l(ku) Y_{lm}^*(\Omega_k) Y_{lm}(\Omega_u) V(u) \times (-i)^{l'} j_{l'}(k'u) Y_{l'm'}(\Omega_{k'}) Y_{l'm'}^*(\Omega_u). \quad (3.22)$$

Dit kan verder worden uitgewerkt door gebruik te maken van de orthogonaliteitsrelatie van bolfuncties:

$$\int_\Omega d\Omega_u Y_{lm}(\Omega_u) Y_{l'm'}(\Omega_u) = \delta_{l'l} \delta_{m'm}, \quad (3.23)$$

tot

$$V(\vec{k}, \vec{k}') = (4\pi)^2 \sum_{\{l,m\}} Y_{lm}^*(\Omega_k) Y_{lm}(\Omega_{k'}) \int_0^\infty u^2 V(u) j_l(ku) j_l(k'u) du. \quad (3.24)$$

Nu is de potentiaal herschreven in termen van bolfuncties en dus angulaire momenten l . De integraal in deze uitdrukking kan echter niet direct verder worden uitgeschreven aangezien $V(u)$ onbekend is. Daarom zal deze laatste integraal worden vervangen door een uitdrukking die hetzelfde gedrag vertoont in de limiet van kleine en grote k (en dus een effectieve potentiaal voorstelt). Voor kleine k kan de sferische Besselfunctie benaderd worden door [42]:

$$\lim_{k \rightarrow 0} j_l(ku) = \frac{2^l l!}{(2l+1)!} (ku)^l. \quad (3.25)$$

Hierdoor kan vgl. (3.24) herschreven worden tot:

$$\lim_{\substack{k \rightarrow 0 \\ k' \rightarrow 0}} V(\vec{k}, \vec{k}') = (4\pi)^2 \sum_{\{l,m\}} Y_{lm}^*(\Omega_k) Y_{lm}(\Omega_{k'}) \frac{2^l l!}{(2l+1)!} \int_0^\infty u^2 V(u) (ku)^l (k'u)^l du. \quad (3.26)$$

Voor grote k kunnen de sferische Besselfuncties worden benaderd met [42]:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} j_l(ku) = \frac{1}{ku} \sin\left(ku - \frac{l\pi}{2}\right). \quad (3.27)$$

In het regime van grote k wordt vgl. (3.24) dus:

$$\lim_{\substack{k \rightarrow \infty \\ k' \rightarrow \infty}} V(\vec{k}, \vec{k}') = (4\pi)^2 \sum_{\{l,m\}} Y_{lm}^*(\Omega_k) Y_{lm}(\Omega_{k'}) \int_0^\infty u^2 V(u) \frac{\sin(ku - \frac{l\pi}{2})}{ku} \frac{\sin(k'u - \frac{l\pi}{2})}{k'u} du. \quad (3.28)$$

De effectieve potentiaal moet dus voor kleine k het gedrag $\sim (kk')^l$ vertonen en voor grote k het gedrag $\sim 1/(kk')$ vertonen. Als we hier ook aannemen dat de potentiaal separabel³ is en kan geschreven worden als

$$V(\vec{k}, \vec{k}') = g \sum_{l,m} \Gamma_{l,m}(\vec{k}) \Gamma_{l,m}^*(\vec{k}'), \quad (3.29)$$

dan kunnen de voorfactoren $\Gamma(k)$ geschreven worden als

$$\Gamma_{l,m}(\vec{k}) = \frac{(k/k_0)^l}{[1 + (k/k_0)^2]^{(l+1)/2}} Y_{lm}(\Omega_k), \quad (3.30)$$

waarbij g is ingevoerd als de interactiesterkte en k_0 als een parameter die omgekeerd evenredig is met de effectieve interactielengte. Deze parameters zijn geen observabelen, maar kunnen wel worden geconnecteerd met fysische grootheden. Aangezien deze thesis alleen p-golf interacties behandelt, en in de meeste gevallen in één specifieke m , valt de sommatie over l en m weg in vlg. (3.29) en wordt dit simpelweg:

$$V_m(\vec{k}, \vec{k}') = g \Gamma_m(\vec{k}) \Gamma_m^*(\vec{k}'), \quad (3.31)$$

waarbij $\Gamma_m = \Gamma_{1,m}$. Deze uitdrukking komt overeen met de effectieve interactiepotentiaal in [24].

³Dit houdt in dat de potentiaal kan geschreven worden als een product van een deel dat afhankelijk is van $\vec{k}$ en een deel dat afhankelijk is van $\vec{k}'$.

3.4.2 Verstrooiingsvolume en effectieve interactie-afstand

Zoals in [24] kan de interactiepotentiaal worden omgeschreven naar het verstrooiingsvolume en effectieve-interactie-afstand. In dit werk is het verstrooiingsvolume en de interactie-afstand afgeleid voor een vergelijkbare potentiaal⁴. De interpretatie van elke grootte uit de verstrooiingstheorie zal hier niet worden gegeven (deze kunnen teruggevonden worden in [46]), maar deze interpretatie is niet strikt noodzakelijk om de berekening te volgen.

De verstrooiingsamplitude $f(\vec{k}, \vec{k}')$ bepaalt hoe twee deeltjes met impulsen $+\vec{k}$ en $-\vec{k}$ verstrooien naar de impulsen $+\vec{k}'$ en $-\vec{k}'$, waarbij de impulsen zijn uitgedrukt in massacenterumcoördinaten. Deze amplitude kan worden ontwikkeld in partiegelgolven (Legendre polynomen) [35, 23]:

$$f(k, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} f_l(k)(2l+1)P_l(\cos(\theta)), \quad (3.32)$$

waarbij $\vec{k} \cdot \vec{k}' = k^2 \cos(\theta)$, hierbij is $k = k'$ omdat de energie voor en na de botsing hetzelfde dient te zijn. Deze energie kan eenvoudig worden bepaald met [23]:

$$\epsilon = \frac{\hbar^2(\vec{k} + \vec{q}/2)^2}{2m} + \frac{\hbar^2(-\vec{k} + \vec{q}/2)^2}{2m} - \frac{\hbar^2 q^2}{4m} = \frac{\hbar^2 k^2}{m} = \frac{\hbar^2 (k')^2}{m}. \quad (3.33)$$

De uitdrukking in vgl. (3.32) wordt meestal geassocieerd met de aannamen dat er wordt gewerkt met een sferisch symmetrische potentiaal. Dit is echter niet het geval (omdat er gewerkt wordt met één m -kanaal), maar de inkomende golven behouden het angulaire moment $\{l, m\}$ waardoor deze vorm toch geldig is [12]. Door opnieuw gebruik maken van het additietheorema, kan dit zoals in vgl. (3.21) herschreven worden naar:

$$f(\vec{k}, \Omega'_k) = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l f_l(k) Y_{lm}(\Omega_k) Y_{lm}^*(\Omega'_k) \quad (3.34)$$

De scatteringamplitude voor de ℓ -wave interacties is [23]:

$$4\pi f_{\ell}(k) = \frac{k^{2\ell}}{-a_{\ell}^{-1} + r_{\ell} k^2/2 - i k^{2\ell} k} \quad \text{voor } k \ll 1, \quad (3.35)$$

hierbij is a_{ℓ} het verstrooiingsvolume en r_{ℓ} de effectieve interactieafstand. De scatteringamplitude kan geassocieerd worden met T-matrix ($T_l(k, k'; E)$) door [23, 24]:

$$f(\vec{k}, \Omega'_k) = -\frac{M}{4\pi\hbar^2} T\left(k, k, \frac{\hbar^2 k^2}{M}\right), \quad (3.36)$$

waarbij M de massa is van een atoom⁵. De T-matrix zelf kan gevonden worden door de standaard uitdrukking [8, 24, 4]:

$$T(\vec{k}, \vec{k}', E^+) = V(\vec{k}, \vec{k}') + \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{V(\vec{k}, \vec{q})}{\left(E^+ - \frac{\hbar^2 q^2}{M}\right)} T(\vec{q}, \vec{k}'; E^+) d\vec{q}, \quad (3.37)$$

⁴Er wordt in dit artikel met andere conventies gewerkt dan in vgl. (3.31) en verstrooiingen naar andere m channels is mee in rekening gebracht.

⁵In veel literatuur wordt deze uitdrukking in termen van de gereduceerde massa $M_r = M/2$ herschreven, dit is hier niet het geval.

met $E^+ = \frac{\hbar^2(k')^2}{M} + i0^+$. Hierin kan de ontwikkelde potentiaal voor p-golf interacties worden ingevuld (vgl. (3.31)) en de T-matrix kan ook geschreven worden als: $tY_{1m}(\Omega_k)Y_{1m}^*(\Omega_{k'})$. Dit levert de nieuwe vergelijking

$$tY_{1m}(\Omega_k)Y_{1m}^*(\Omega_{k'}) = g\Gamma_m(k)\Gamma_m^*(k)Y_{1m}(\Omega_k)Y_{1m}^*(\Omega_{k'}) + \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty q^2 dq \int_{\Omega_q} d\Omega_q \frac{g\Gamma_m(k)\Gamma_m^*(q)Y_{1m}(\Omega_k)Y_{1m}^*(\Omega_q)}{\left(E^+ - \frac{\hbar^2 q^2}{M}\right)} tY_{1m}(\Omega_q)Y_{1m}^*(\Omega_k). \quad (3.38)$$

Hierbij is $\Gamma_m(\vec{k})$ uit vgl. (3.30) geschreven als $\Gamma_m(k)Y_{1m}$ en is de integraal naar bolcoördinaten herschreven. Gebruikmakend van de orthogonaliteitsrelatie van bolfuncties (vgl. (3.23)), kan de integraal over de sferische hoek eenvoudig worden uitgewerkt. De overblijvende bolfuncties zijn in elk lid hetzelfde en kunnen dus geschrapt worden, dit leidt tot de vergelijking:

$$t = g\Gamma_m(k)\Gamma_m^*(k) + \int_0^\infty \frac{g\Gamma_m(k)\Gamma_m^*(q)}{\left(E^+ - \frac{\hbar^2 q^2}{M}\right)} tq^2 dq. \quad (3.39)$$

Deze vergelijking heeft als oplossing [24, 8]:

$$\frac{1}{t(k, k', E_+)} = \left[\frac{1}{g} - \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \frac{\Gamma_m^2(k)}{E_+ - 2\epsilon_k} k^2 dk \right] \frac{1}{\Gamma_m(k)\Gamma_m^*(k')}, \quad (3.40)$$

waarbij $\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2M}$. Aangezien $E_+ = E + i\epsilon$ kan hier de formule van Plemelj [65] worden toegepast:

$$\frac{1}{t(k, k', E_+)} = \left[\frac{1}{g} - \frac{1}{(2\pi)^3} \left(\mathcal{P} \int_0^\infty \frac{\Gamma_m^2(k)}{E - 2\epsilon_k} k^2 dk - i\pi \int_0^\infty \delta(E - 2\epsilon_k) \Gamma_m^2(k) k^2 dk \right) \right] \times \frac{1}{\Gamma_m(k)\Gamma_m^*(k')}. \quad (3.41)$$

De tweede integraal kan eenvoudig worden berekend, hiervoor dient echter eerst de delta distributie worden omgeschreven:

$$\delta(E - 2\epsilon_k) = \delta\left(E - \frac{(\hbar k)^2}{m}\right) = \frac{\delta\left(k \pm \frac{\sqrt{ME}}{\hbar}\right)}{\frac{2k\hbar^2}{m}}. \quad (3.42)$$

Wat dus resulteert in de uitdrukking:

$$\frac{1}{t(k, k', E_+)} = \left[\frac{1}{g} - \frac{1}{(2\pi)^3} \left(\mathcal{P} \int_0^\infty \frac{\Gamma_m^2(k)}{E - 2\epsilon_k} k^2 dk - i\pi \Gamma_m^2\left(\frac{\sqrt{ME}}{\hbar}\right) \frac{\sqrt{ME}}{\hbar} \frac{m}{2\hbar^2} \right) \right] \times \frac{1}{\Gamma_m(k)\Gamma_m^*(k')}. \quad (3.43)$$

Dit kan geëxpandeerd worden voor lage energieën, de afleiding beperkt zich hier to p-golf interacties ($l = 1$):

$$\frac{1}{t(k, k', E_+)} = \left[\frac{1}{g} + \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \frac{\Gamma_m^2(k)}{2\epsilon_k} k^2 dk + \frac{E}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \frac{\Gamma_m^2(k)}{4\epsilon_k^2} k^2 dk + \frac{i\pi m}{(2\pi)^3 2\hbar^2} \Gamma_m^2\left(\frac{\sqrt{ME}}{\hbar}\right) \frac{\sqrt{ME}}{\hbar} + O(E^2) \right] \left[\frac{1 + (k/k_0)^2}{k/k_0} \frac{1 + (k'/k_0)^2}{k'/k_0} \right]. \quad (3.44)$$

Gebruikmakend van $T = tY_{1m}(\Omega_k)Y_{1m}^*(\Omega_{k'})$, vgl. (3.36) en vgl. (3.35) kunnen g en k_0 worden geassocieerd met het verstrooiingsvolume $a(\equiv a_1)$ en effectieve lengte $r(\equiv r_1)$:

$$\frac{1}{4\pi f_l(k)} = -\frac{4\pi\hbar^2}{M} \frac{1}{t(k, k, \frac{\hbar^2 k^2}{M})} \quad (3.45)$$

en dus

$$\begin{aligned} \frac{-a^{-1} + rk^2/2 - ik^3}{4\pi k^2} = & -\frac{4\pi\hbar^2}{M} \left[\frac{1}{g} + \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \frac{\Gamma_m^2(k)}{2\epsilon_k^2} k^2 dk + \frac{2\epsilon_k}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \frac{\Gamma_m^2(k)}{4\epsilon_k^2} k^2 dk \right. \\ & \left. + \frac{i\pi m}{(2\pi)^3 2\hbar^2} \Gamma_m^2(k)k + O(k^4) \right] \left[\left(\frac{k_0}{k} \right)^2 + 2 + \left(\frac{k}{k_0} \right)^2 \right]. \end{aligned} \quad (3.46)$$

Termen met dezelfde macht van k in het linkerlid en rechterlid gelijkstellen levert:

$$\frac{m}{(4\pi)^2 \hbar^2 k_0^2 a} = \frac{1}{g} + \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \frac{\Gamma^2(k)}{2\epsilon_k^2} k^2 dk = \frac{1}{g} + \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{|\Gamma(\vec{k})|^2}{2\epsilon_k^2} d\vec{k}. \quad (3.47)$$

en

$$r = -2\pi k_0 \left(\frac{\hbar^2}{M} \right)^2 \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \frac{\Gamma_m^2(k)}{\epsilon_k^2} k^2 dk - \frac{4}{M k_0^2 a}. \quad (3.48)$$

In de eerste uitdrukking is in de laatste stap gebruikgemaakt van de orthogonaliteit van bolfuncties (vgl. (3.23)) om over te gaan naar een driedimensionale integraal. Dit zal in een later hoofdstuk de berekening makkelijker maken. De uitdrukkingen komen overeen met [24] indien de definitie van g wordt gewijzigd. In [24] werd er gesommeerd over alle m -kanalen voor de potentiaal, maar dit blijkt geen invloed te hebben op de resultaten. Dit is te verwachten aangezien paren in een bepaald m -kanaal ook zullen verstrooid worden naar hetzelfde m -kanaal.

De bekomen uitdrukking in vgl. (3.47) zal verder in de thesis worden gebruikt, in dit stuk zal echter worden gewerkt met natuurlijke eenheden van $\vec{k}_F$ en E_F . Daarom zal hier ook worden overgeschakeld op dimensieloze eenheden, dit komt neer op $\hbar, 2m, k_F$ en k_B gelijk te stellen aan één. Hierdoor worden golfgetallen in de nieuwe eenheid $\tilde{k} = k k_F$ uitgedrukt en de interactiesterkte wordt $\tilde{g} = \frac{k_F^3}{E_F} k$. Dit alles doorvoeren en de tildes weg laten, leidt tot:

$$\frac{1}{g} = \frac{1}{2(4\pi)^2 k_0^2 (k_F^3 a)} - \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{|\Gamma(\vec{k})|^2}{2k^2} d\vec{k}. \quad (3.49)$$

Hierbij is het verstrooiingsvolume $k_F^3 a$ dimensieloos geworden. In de rest van de thesis zal k_0 worden gebruikt in plaats van effectieve lengte.

3.5 De toestandssom

Nu de actie en de potentiaal gekend is, kan met vgl. (2.13) de toestandssom worden bepaald. Deze uitdrukking is echter alleen geldig voor scalaire velden en moet dus eerst met vgl. (2.17) worden uitgebreid naar de Grassmannvelden $\bar{\psi}$ en ψ :

$$Z = \int \mathcal{D}\bar{\psi}_{\vec{r},\tau,\sigma} \int \mathcal{D}\psi_{\vec{r},\tau,\sigma} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} S_E[\{\bar{\psi}_{\vec{r},\tau,\sigma}, \psi_{\vec{r},\tau,\sigma}\}] \right\}. \quad (3.50)$$

In de vorige sectie is er ook overgeschakeld naar de Fourierruimte en de toestandssom zal dus ook moeten worden omgeschreven:

$$Z = \int \mathcal{D}\bar{\psi}_{\vec{k},n,\sigma} \int \mathcal{D}\psi_{\vec{k},n,\sigma} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} S_E \left[\{\bar{\psi}_{\vec{k},n,\sigma}, \psi_{\vec{k},n,\sigma}\} \right] \right\}. \quad (3.51)$$

Deze padintegraal in de Fourierruimte kan op juist dezelfde manier worden geïnterpreteerd als in de gewone ruimte.

Om de actie handelbaar te maken zal het interactiedeel van de actie worden herschreven met de Hubbard-Stratonovic transformatie. Deze transformatie zal niet worden afgeleid, maar kan worden teruggevonden in [13]. De interactie-actie is gegeven in vgl. (3.18) en kan samen met de potentiaal gegeven in vgl. (3.31) worden geschreven als:

$$S_I = \frac{1}{\beta V} \sum_{\vec{q},m} \sum_{\vec{k},n} \sum_{\vec{k}',n'} \bar{\psi}_{\vec{q}/2+\vec{k},m/2+n,\uparrow} \bar{\psi}_{\vec{q}/2-\vec{k},m/2-n,\uparrow} \left(g \Gamma_m(\vec{k}) \Gamma_m^*(\vec{k}') \right) \times \psi_{\vec{q}/2-\vec{k}',m/2-n',\uparrow} \psi_{\vec{q}/2+\vec{k}',m/2+n',\uparrow}. \quad (3.52)$$

Dit kan nu herschreven worden naar

$$S_I = g \sum_{\vec{q},m} \bar{A}_{\vec{q},m} A_{\vec{q},m}, \quad (3.53)$$

waarbij:

$$A_{\vec{q},m} = \sum_{\vec{k},n} \frac{\Gamma^*(\vec{k})}{\sqrt{\beta V}} \psi_{(\vec{q}/2)-\vec{k},(m/2)-n,\downarrow} \psi_{(\vec{q}/2)+\vec{k},(m/2)+n,\uparrow} \quad (3.54)$$

en

$$\bar{A}_{\vec{q},m} = \sum_{\vec{k},n} \frac{\Gamma(\vec{k})}{\sqrt{\beta V}} \bar{\psi}_{(\vec{q}/2)+\vec{k},(m/2)+n,\uparrow} \bar{\psi}_{(\vec{q}/2)-\vec{k},(m/2)-n,\downarrow}. \quad (3.55)$$

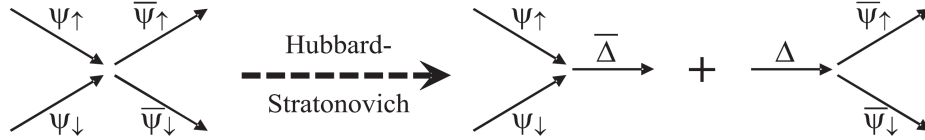
Hierop de Hubbard-Stratonovic transformatie toepassen levert:

$$Z = \int \mathcal{D}\bar{\psi}_{\vec{k},n,\sigma} \int \mathcal{D}\psi_{\vec{k},n,\sigma} \int \mathcal{D}\bar{\Delta}_{\vec{q},m} \int \mathcal{D}\Delta_{\vec{q},m} \exp \left\{ - \sum_{\vec{k},n,\sigma} \bar{\psi}_{\vec{k},n,\sigma} (-i\omega_n + k^2 - \mu_\sigma) \psi_{\vec{k},n,\sigma} + \sum_{\vec{q},m} \left(\frac{\bar{\Delta}_{\vec{q},m} \Delta_{\vec{q},m}}{g} + \bar{\Delta}_{\vec{q},m} A_{\vec{q},m} + \Delta_{\vec{q},m} \bar{A}_{\vec{q},m} \right) \right\} \quad (3.56)$$

wat dus expliciet uitgeschreven neerkomt op:

$$Z = \int \mathcal{D}\bar{\psi}_{\vec{k},n,\sigma} \int \mathcal{D}\psi_{\vec{k},n,\sigma} \int \mathcal{D}\bar{\Delta}_{\vec{q},m} \int \mathcal{D}\Delta_{\vec{q},m} \exp \left\{ - \sum_{\vec{q},m} \frac{\bar{\Delta}_{\vec{q},m} \Delta_{\vec{q},m}}{g} \right\} \times \exp \left\{ - \sum_{\vec{k},n,\sigma} \left(\bar{\psi}_{\vec{k},n,\sigma} (-i\omega_n + k^2 - \mu_\sigma) \psi_{\vec{k},n,\sigma} - \frac{1}{\beta V} \sum_{\vec{q},m} \left(\Gamma^*(\vec{k}) \Delta_{\vec{q},m}^* \psi_{(\vec{q}/2)-\vec{k},(m/2)-n,\downarrow} \psi_{(\vec{q}/2)+\vec{k},(m/2)+n,\uparrow} + \Gamma(\vec{k}) \bar{\Delta}_{\vec{q},m} \bar{\psi}_{(\vec{q}/2)+\vec{k},(m/2)+n,\uparrow} \bar{\psi}_{(\vec{q}/2)-\vec{k},(m/2)-n,\downarrow} \right) \right) \right\} \quad (3.57)$$

Bij deze transformatie zijn er twee nieuwe velden Δ en $\bar{\Delta}$ ingevoerd. Deze velden komen overeen met de “paarvelden”. Als twee fermionen met een tegengestelde spin interageren, kunnen ze paren vormen die in hun geheel bosonen zijn (deze kunnen worden beschreven met quasideeltjes). Deze paren kunnen ook terug uit elkaar vallen, dit is grafisch weergegeven in figuur 3.1. Deze paren komen dus ook overeen met de Cooperparen in het BCS-regime of met de molecule in het BEC regime, zoals aangehaald in sectie 1.1.3.



Figuur 3.1: Grafische voorstelling van de Hubbard-Stratonovic transformatie. Hierbij zijn de ψ en $\bar{\psi}$ fermionische velden met een bepaalde spin en zijn Δ en $\bar{\Delta}$, bosonische velden. [57]

3.6 Nambu spinoren

Om de fermionische padintegraal verder uit te werken zullen de Grassmann variabelen ψ en $\bar{\psi}$ worden vervangen door de Nambu spinoren:

$$\eta_{\vec{k},n} = \begin{pmatrix} \psi_{\vec{k},n,\uparrow} \\ \bar{\psi}_{-\vec{k},-n,\downarrow} \end{pmatrix} \quad (3.58)$$

en

$$\bar{\eta}_{\vec{k},n} = (\bar{\psi}_{\vec{k},n,\uparrow} \quad \psi_{-\vec{k},-n,\downarrow}). \quad (3.59)$$

Hiervoor zal ook de overgang moeten worden gemaakt van

$$\int \mathcal{D}\bar{\psi}_{\vec{k},n,\sigma} \int \mathcal{D}\psi_{\vec{k},n,\sigma} \equiv \prod_{\vec{k},n,\sigma} \left(\int d\bar{\psi}_{\vec{k},n,\sigma} \int d\psi_{\vec{k},n,\sigma} \right) \quad (3.60)$$

naar

$$\int \mathcal{D}\bar{\eta}_{\vec{k},n} \mathcal{D}\eta_{\vec{k},n} \equiv \prod_{\vec{k},n} \left(\int d\bar{\eta}_{\vec{k},n,1} \int d\eta_{\vec{k},n,1} \int d\bar{\eta}_{\vec{k},n,2} \int d\eta_{\vec{k},n,2} \right), \quad (3.61)$$

wat gelijk is aan

$$\int \mathcal{D}\bar{\eta}_{\vec{k},n} \mathcal{D}\eta_{\vec{k},n} = \prod_{\vec{k},n} \left(\int d\bar{\psi}_{\vec{k},n,\uparrow} \int d\psi_{\vec{k},n,\uparrow} \int d\psi_{-\vec{k},-n,\downarrow} \int d\bar{\psi}_{-\vec{k},-n,\downarrow} \right). \quad (3.62)$$

Rekeninghoudend met vgl. (2.1), kan de uitdrukking in vgl. (3.60) hiernaar herschreven worden:

$$\begin{aligned}
\int \mathcal{D}\bar{\psi}_{\vec{k},n,\sigma} \int \mathcal{D}\psi_{\vec{k},n,\sigma} &\equiv \prod_{\vec{k},n,\sigma} \left(\int d\bar{\psi}_{\vec{k},n,\sigma} \int d\psi_{\vec{k},n,\sigma} \right) \\
&= \left[\prod_{\vec{k},n} \left(\int d\bar{\psi}_{\vec{k},n,\uparrow} \int d\psi_{\vec{k},n,\uparrow} \right) \right] \left[\prod_{\vec{k},n} \left(\int d\bar{\psi}_{-\vec{k},-n,\downarrow} \int d\psi_{-\vec{k},-n,\downarrow} \right) \right] \\
&= \prod_{\vec{k},n} \left(\int d\bar{\psi}_{\vec{k},n,\uparrow} \int d\psi_{\vec{k},n,\uparrow} \int d\bar{\psi}_{-\vec{k},-n,\downarrow} \int d\psi_{-\vec{k},-n,\downarrow} \right) \\
&= \prod_{\vec{k},n} (-1) \left(\int d\bar{\psi}_{\vec{k},n,\uparrow} \int d\psi_{\vec{k},n,\uparrow} \int d\psi_{-\vec{k},-n,\downarrow} \int d\bar{\psi}_{-\vec{k},-n,\downarrow} \right). \quad (3.63)
\end{aligned}$$

In de eerste stap is nogmaals de definitie gegeven, in de tweede stap is het product over de spin (σ) uitgevoerd en in de tweede term is $\{\vec{k}, n\} \rightarrow \{-\vec{k}, -n\}$, maar aangezien over alle k en n het product wordt genomen heeft dit geen invloed op het totale product. In de derde stap is dit terug samengezet, aangezien steeds twee Grassmann variabelen samen worden verzet is er nergens een minteken. In de laatste stap zijn de laatste twee integralen omgedraaid, wat resulteert in een minteken. Samengevat levert dit dus:

$$\int \mathcal{D}\bar{\psi}_{\vec{k},n,\sigma} \int \mathcal{D}\psi_{\vec{k},n,\sigma} = \int \mathcal{D}\bar{\eta}_{\vec{k},n} \int \mathcal{D}\eta_{\vec{k},n} \prod_{\vec{k},n} (-1). \quad (3.64)$$

Deze Nambu spinoren kunnen nu worden gebruikt om de toestandssom in vgl. (3.57) te beschrijven tot:

$$\begin{aligned}
Z &= \int \mathcal{D}\bar{\Delta}_{\vec{q},m} \int \mathcal{D}\Delta_{\vec{q},m} \exp \left\{ - \sum_{\vec{q},m} \frac{\bar{\Delta}_{\vec{q},m} \Delta_{\vec{q},m}}{g} \right\} \\
&\times \int \mathcal{D}\bar{\psi}_{\vec{k},n,\sigma} \int \mathcal{D}\psi_{\vec{k},n,\sigma} \exp \left\{ - \sum_{\vec{k},n} \sum_{\vec{k}',n'} \bar{\eta}_{\vec{k}',n'} \cdot \langle \vec{k}', n' | -\mathbb{G}^{-1} | \vec{k}, n \rangle \cdot \eta_{\vec{k},n} \right\}, \quad (3.65)
\end{aligned}$$

waarbij $\langle \vec{k}', n' | -\mathbb{G}^{-1} | \vec{k}, n \rangle$ overeenkomt met de spin-matrix. De matrix $-\mathbb{G}^{-1}$ is een enorme matrix die opgebouwd is uit blokmatrices (de spinmatrices). De elementen van deze blokmatrices zelf zijn gelabeld met een $\{\vec{k}, n\}$ en $\{\vec{k}', n'\}$ waarden die overeenkomend met de Nambu spinoren die er rond staan. De effectieve vorm van deze matrix zal duidelijk worden in de volgende sectie en sectie 4.1.2.

3.7 Zadelpuntsbenadering

In zowel de BCS, de BEC en de overgang ertussen, is de meest eenvoudige benadering die kan worden gemaakt, dat de bosonische paarvelden gecondenseerd zijn in de grondtoestand. Dit komt overeen met aannamen dat de molecule in het BEC regime en de Cooperparen in het BCS regime een volledig Bose-Einstein condensaat vormen. Dit is gelijkaardig aan de

Bogoliubov benadering voor superfluïde helium. Hierdoor kan het veld dus benaderd worden door:

$$\begin{cases} \Delta_{\vec{q},m} = \sqrt{\beta V} \delta(\vec{q}) \delta_{m,0} \Delta \\ \bar{\Delta}_{\vec{q},m} = \sqrt{\beta V} \delta(\vec{q}) \delta_{m,0} \Delta^* \end{cases} \quad (3.66)$$

Dit wil dus ook zeggen dat als $\Delta = 0$ er geen paarvorming zal optreden. Deze uitdrukking invullen in vgl. (3.57) levert een sterk vereenvoudigde uitdrukking:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_{sp} = & \int \mathcal{D}\bar{\psi}_{\vec{k},n,\sigma} \mathcal{D}\psi_{\vec{k},n,\sigma} \exp \left(\frac{\beta V}{g} |\Delta|^2 - \sum_{\vec{k},n} (-i\omega_n + k^2 - \mu_{\uparrow}) \bar{\psi}_{\vec{k},n,\uparrow} \psi_{\vec{k},n,\uparrow} \right. \\ & - \sum_{\vec{k},n} (-i\omega_n - k^2 + \mu_{\downarrow}) \bar{\psi}_{\vec{k},n,\downarrow} \psi_{\vec{k},n,\downarrow} \\ & \left. + \sum_{\vec{k},n} \left(\Gamma(\vec{k}) \Delta \bar{\psi}_{\vec{k},n,\uparrow} \bar{\psi}_{\vec{k},n,\downarrow} + \Gamma^*(\vec{k}) \Delta^* \psi_{\vec{k},n,\downarrow} \psi_{\vec{k},n,\uparrow} \right) \right). \end{aligned} \quad (3.67)$$

Hierbij is de eerste term na de sommatie gesplitst in een term voor spin op en spin neer. Dit kan nu in de vorm van vgl. (3.65) worden geschreven waarbij de matrix $\mathbb{G}^{-1}$ diagonaal is geworden in k en n :

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}', n' | -\mathbb{G}_{sp}^{-1} | \vec{k}, n \rangle &= \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \delta_{n,n'} \begin{pmatrix} -i\omega_n + k^2 - \mu_{\uparrow} & -\Gamma(\vec{k}) \Delta \\ -\Gamma^*(\vec{k}) \Delta^* & -i\omega_n - k^2 + \mu_{\downarrow} \end{pmatrix} \\ &\equiv \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \delta_{n,n'} (\mathbb{G}_{sp}^{-1})_{\vec{k},n} \end{aligned} \quad (3.68)$$

en dus de uitdrukking voor de toestandssom wordt

$$\mathcal{Z}_{sp} = \int \mathcal{D}\bar{\psi}_{\vec{k},n,\sigma} \mathcal{D}\psi_{\vec{k},n,\sigma} \exp \left\{ \frac{\beta V}{g} |\Delta|^2 - \sum_{\vec{k},n} \bar{\eta}_{\vec{k},n} \cdot (-\mathbb{G}_{sp}^{-1})_{\vec{k},n} \cdot \eta_{\vec{k},n} \right\}. \quad (3.69)$$

Met vgl. (3.64) kunnen de integralen worden herschreven tot

$$\mathcal{Z}_{sp} = \int \mathcal{D}\bar{\eta}_{\vec{k},n} \int \mathcal{D}\eta_{\vec{k},n} \prod_{\vec{k},n} (-1) \exp \left\{ \frac{\beta V}{g} |\Delta|^2 - \sum_{\vec{k},n} \bar{\eta}_{\vec{k},n} \cdot (-\mathbb{G}_{sp}^{-1})_{\vec{k},n} \cdot \eta_{\vec{k},n} \right\}. \quad (3.70)$$

En met de definitie van de padintegralen over Nambu spinoren (vgl. (3.61)) tot:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_{sp} = & \prod_{\vec{k},n} (-1) \left[\int d\bar{\eta}_{\vec{k},n,1} \int d\eta_{\vec{k},n,1} \int d\bar{\eta}_{\vec{k},n,2} \int d\eta_{\vec{k},n,2} \right. \\ & \left. \times \exp \left\{ \frac{\beta V}{g} |\Delta|^2 - \sum_{\vec{k},n} \bar{\eta}_{\vec{k},n} \cdot (-\mathbb{G}_{sp}^{-1})_{\vec{k},n} \cdot \eta_{\vec{k},n} \right\} \right]. \end{aligned} \quad (3.71)$$

De integraal tussen vierkante haakjes kan worden gezien als een fermionische padintegraal, waarvan de velden maar twee waarden kunnen aannemen (1 en 2). De integraal is dus eenvoudig uit te rekenen door gebruik te maken van vgl. (2.18):

$$\mathcal{Z}_{sp} = \prod_{\vec{k},n} (-1) \exp \left\{ \frac{\beta V}{g} |\Delta|^2 \right\} \det (-\mathbb{G}_{sp}^{-1})_{\vec{k},n}. \quad (3.72)$$

Het zal nuttig blijken de determinant terug in een exponent te schrijven wat leidt tot:

$$\prod_{\vec{k},n} (-1) \det(-\mathbb{G}_{sp}^{-1})_{\vec{k},n} = \prod_{\vec{k},n} \exp\left\{\ln[-\det(-\mathbb{G}_{sp}^{-1})_{\vec{k},n}]\right\} = \exp\left\{\sum_{\vec{k},n} \ln[-\det(-\mathbb{G}_{sp}^{-1})_{\vec{k},n}]\right\}. \quad (3.73)$$

Dit maakt dat de toestandssom nu kan worden geschreven als

$$\mathcal{Z}_{sp} = \prod_{\vec{k},n} (-1) \exp\left\{\frac{\beta V}{g} |\Delta|^2 - \sum_{\vec{k},n} \ln[-\det(-\mathbb{G}_{sp}^{-1})_{\vec{k},n}]\right\}. \quad (3.74)$$

De determinant van de matrix (vgl. (3.68)) kan eenvoudig worden uitgewerkt:

$$-\det(-\mathbb{G}_{sp}^{-1})_{\vec{k},n} = -(-i\omega_n + k^2 - \mu_\uparrow)(-i\omega_n - k^2 + \mu_\downarrow) + |\Gamma(\vec{k})\Delta|^2. \quad (3.75)$$

Het is nuttig om de twee chemische potentialen te vervangen door twee nieuwe chemische potentialen:

$$\begin{cases} \mu = \frac{\mu_\uparrow + \mu_\downarrow}{2} \\ \zeta = \frac{\mu_\uparrow - \mu_\downarrow}{2} \end{cases}. \quad (3.76)$$

Uit deze notatie volgt rechtstreeks, dat als $\zeta = 0$ wordt gekozen, er geen spinonbalans is. De Bogoliubov energie wordt hier ook ingevoerd als:

$$E_{\vec{k}} = \sqrt{\xi_k^2 + |\Gamma(\vec{k})\Delta|^2} \quad (3.77)$$

waarbij

$$\xi_k = k^2 - \mu \quad (3.78)$$

de energie is van een vrij atoom. Deze nieuwe notatie doorvoeren in vgl. (3.75) levert

$$-\det(-\mathbb{G}_{sp}^{-1})_{\vec{k},n} = (i\omega_n + \zeta - E_{\vec{k}})(-i\omega_n - \zeta - E_{\vec{k}}). \quad (3.79)$$

Dit is het eenvoudigste na te gaan door de definities van de nieuwe notatie terug in te vullen en gelijk te stellen aan de originele uitdrukking. Deze vorm kan terug in vgl. (3.72) worden gesubstitueerd:

$$\mathcal{Z}_{sp} = \exp\left\{\frac{\beta V}{g} |\Delta|^2 + \sum_{\vec{k},n} \ln[(i\omega_n + \zeta - E_{\vec{k}})(-i\omega_n - \zeta - E_{\vec{k}})]\right\}. \quad (3.80)$$

3.7.1 De Bogoliubov energie

In vgl. (3.77) is de Bogoliubov energie gebruikt als een nieuwe notatie, dit is een gekende grootheid uit BCS-theorie. In de standaard Hamiltoniaanse beschrijving van een BCS superfluïda, wordt een zogenaamde Bogoliubov transformatie uitgevoerd waardoor het systeem kan worden beschreven met quasideeltjes. In deze Lagrangiaanse theorie, kan exact hetzelfde worden gedaan [62]. De Bogoliubov transformatie zal de Greense functie (vgl. (3.68)) diagonaliseren. Met elk type quasideeltje, wat in ons geval de *quasideeltjes* en *quasigaten*

worden genoemd, zal hier een Greense functie overeenkomen waaruit de energie kan worden bepaald. De gedagonaliseerde matrix komt overeen met:

$$S_{sp} = \sum_{\vec{k},n} \bar{\eta}_{\vec{k},n} P^\dagger P (-\mathbb{G}_{sp}^{-1}) P^\dagger P \eta_{\vec{k},n} = \sum_{\vec{k},n} \bar{\gamma}_{\vec{k},n} \begin{pmatrix} -i\omega_m - \zeta - E_{\vec{k}} & 0 \\ 0 & -i\omega_m - \zeta + E_{\vec{k}} \end{pmatrix} \gamma_{\vec{k},n}, \quad (3.81)$$

hierbij is P de transformatiematrix⁶ die de matrix diagonaliseert, γ en $\bar{\gamma}$ zijn de Nambu spinoren die overeenkomen met de quasideeltjes. De Matsubare Greense functie kan nu eenvoudig worden afgelezen. De polen van deze Greense functie komen overeen met de energieën van de quasideeltjes, die dus gelijk zijn aan:

$$E_+ = -\zeta + E_{\vec{k}} \quad \text{en} \quad E_- = -\zeta - E_{\vec{k}}. \quad (3.82)$$

Als er geen spinonbalans is, komt dit overeen met het resultaat verkregen in [54]. Dit maakt dus dat er twee energietakken zijn, één met een positieve energie (quasideeltje) en één met een negatieve energie (quasigat)⁷. Het verschil van deze energiebanden geeft de energie weer die nodig is om een paar op te splitsen in twee aparte fermionen en is dus gelijk aan $2E_k$, het minima van deze energie komt dus overeen met de minimale energie op een paar op te splitsen:

$$\Delta E = \min_{\vec{k}} \left[2\sqrt{(k^2 - \mu)^2 - |\Delta\Gamma(\vec{k})|} \right]. \quad (3.83)$$

Hierop zal nog verder op ingegaan worden in hoofdstuk 5.

3.8 Vrije energie

Zoals in vgl. (2.14) aangehaald, kan de toestandssom direct worden gerelateerd aan de vrije energie (F_{sp}). Het is echter interessant om de vrije energie per volume eenheid (Ω_{sp}) te onderzoeken. Deze kan dan op een zeer eenvoudige wijze aan de toestandssom worden gerelateerd:

$$Z = \exp\{-\beta F_{sp}(T, V, \mu, \zeta)\} = \exp\{-\beta V \Omega_{sp}(T, V, \mu, \zeta)\} \quad (3.84)$$

waarbij dan uiteraard

$$\Omega_{sp}(T, V, \mu, \zeta) = \frac{1}{V} (F_{sp}(T, V, N, \delta N) - \mu N - \zeta \delta N) \equiv \Omega(T, V, N, \delta N) - \mu n - \zeta \delta n, \quad (3.85)$$

hierbij is T de temperatuur, V het volume, N het aantal atomen, δN het verschil tussen het aantal atomen met spin op en spin neer, n het aantal atomen per volumen eenheid en δn het verschil per volumeenheid. De twee chemische potentialen kunnen nu expliciet worden berekend met:

$$n = - \frac{\partial \Omega(T, V, \mu, \zeta)}{\partial \mu} \bigg|_{T, V, \zeta} \quad \text{en} \quad \delta n = - \frac{\partial \Omega(T, V, \mu, \zeta)}{\partial \zeta} \bigg|_{T, V, \mu}. \quad (3.86)$$

⁶De vorm van deze matrix is niet relevant maar wordt toch ter volledigheid gegeven:

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\Gamma^*(\vec{k})\Delta^*} \begin{pmatrix} -\xi_{\vec{k}} + \sqrt{|\Gamma(\vec{k})\Delta|^2 + \xi_{\vec{k}}^2} \\ 1 \end{pmatrix} & \frac{1}{\Gamma^*(\vec{k})\Delta^*} \begin{pmatrix} -\xi_{\vec{k}} - \sqrt{|\Gamma(\vec{k})\Delta|^2 + \xi_{\vec{k}}^2} \\ 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix}$$

⁷Dit kan geïnterpreteerd worden als deeltjes en anti-deeltjes op dezelfde manier als gaten en elektronen bij halfgeleiders.[6]

Deze twee vergelijkingen leggen het aantal atomen van iedere soort vast en staan gekend als de nummervergelijkingen. Merk hierbij op dat als er geen spin onbalans is, dan is ζ automatisch gelijk aan nul aangezien $\mu_{\uparrow} = \mu_{\downarrow}$. Dit zorgt er dan ook voor dat de tweede nummervergelijking niet zinvol meer is.

Vanaf hier zal als er wordt gerefereerd naar de vrije energie, de vrije energie per volume worden bedoeld. Deze kan nu expliciet worden berekend met vgl. (3.80) en (3.84):

$$\Omega_{sp}(T, \mu, \zeta; \Delta) = -\frac{1}{g} |\Delta|^2 - \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\beta} \sum_n \ln [(i\omega_n + \zeta - E_{\vec{k}})(-i\omega_n - \zeta - E_{\vec{k}})], \quad (3.87)$$

Er kan nu overgegaan worden naar een integraal over $\vec{k}$ in plaats van een sommatie over $\vec{k}$ door $V^{-1} \sum_{\vec{k}} \rightarrow (2\pi)^{-3} \int d\vec{k}$ en daarbovenop kunnen de verschoven Matsubara frequenties:

$$i\nu_n = i\omega_n + \zeta, \quad (3.88)$$

worden ingevoerd, wat samen leidt tot

$$\Omega_{sp}(T, \mu, \zeta; \Delta) = -\frac{1}{g} |\Delta|^2 - \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \left[\frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \ln [-(i\nu_n + E_{\vec{k}})(i\nu_n - E_{\vec{k}})] \right]. \quad (3.89)$$

Als laatste stap moet de Matsubara sommatie over n worden uitgerekend [57]:

$$\frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \ln [-(i\nu_n - E_{\vec{k}})(i\nu_n + E_{\vec{k}})] = \frac{1}{\beta} \ln [2 \cosh(\beta E_{\vec{k}}) + 2 \cosh(\beta \zeta)] - \xi_k + \sum_{n=-\infty}^{\infty} \ln (\nu_n^2). \quad (3.90)$$

De laatste term in deze vergelijking divergeert en is dus onfysisch. Aangezien deze term niet afhangt van systeemparemeters kan deze worden weggelaten, wat overeenkomt met een equivalente vrije energie. De vrije energie wordt dus:

$$\Omega_{sp}(T, \mu, \zeta; \Delta) = -\frac{1}{g} |\Delta|^2 - \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \left[\frac{1}{\beta} \ln [2 \cosh(\beta E_{\vec{k}}) + 2 \cosh(\beta \zeta)] - \xi_k \right]. \quad (3.91)$$

De vrije energie is nog afhankelijk van de parameter Δ en zal dus nog moeten worden geminimaliseerd:

$$\frac{\partial \Omega_{sp}}{\partial \Delta} = 0, \quad (3.92)$$

waaruit de Gap-vergelijking volgt:

$$-\frac{1}{g} = \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{|\Gamma(\vec{k})|^2}{2E_{\vec{k}}} \frac{\sinh(\beta E_{\vec{k}})}{\cosh(\beta E_{\vec{k}}) + \cosh(\beta \zeta)}. \quad (3.93)$$

Hierbij is gebruik gemaakt van:

$$\frac{\partial}{\partial E_{\vec{k}}} \left(\ln [2 \cosh(\beta E_{\vec{k}}) + 2 \cosh(\beta \zeta)] \right) = \beta \frac{\sinh(\beta E_{\vec{k}})}{\cosh(\beta E_{\vec{k}}) + \cosh(\beta \zeta)} \quad (3.94)$$

Deze uitdrukking kan met vgl. (3.49) naar een praktischere vorm worden geschreven:

$$-\frac{1}{2(4\pi)^2 k_0^2 (k_F^3 a)} = \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} |\Gamma(\vec{k})|^2 \left[\frac{1}{2E_{\vec{k}}} \frac{\sinh(\beta E_{\vec{k}})}{\cosh(\beta E_{\vec{k}}) + \cosh(\beta \zeta)} - \frac{1}{2k^2} \right], \quad (3.95)$$

wat verder herschreven kan worden tot:

$$-\frac{1}{k_F^3 a} = \frac{2k_0^2}{\pi} \int d\vec{k} \left| \Gamma(\vec{k}) \right|^2 \left[\frac{1}{E_{\vec{k}} \cosh(\beta E_{\vec{k}}) + \cosh(\beta \zeta)} - \frac{1}{k^2} \right]. \quad (3.96)$$

De vrije energie zelf (vgl. (3.91)) kan eveneens worden herschreven met vgl. (3.49):

$$\begin{aligned} \Omega_{sp}(T, \mu, \zeta; \Delta) &= -\frac{1}{2(4\pi)^2 k_0^2 (k_F^3 a)} |\Delta|^2 \\ &\quad - \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \left[\frac{1}{\beta} \ln [2 \cosh(\beta E_{\vec{k}}) + 2 \cosh(\beta \zeta)] - \xi_{\vec{k}} - \left| \Gamma(\vec{k}) \right|^2 \frac{|\Delta|^2}{2k^2} \right]. \end{aligned} \quad (3.97)$$

Op het eerste zicht lijkt deze integraal divergent, maar voor grote k kan het logaritme worden geëxpandeerd tot:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \ln [2 \cosh(\beta E_{\vec{k}}) + 2 \cosh(\beta \zeta)] = \lim_{k \rightarrow \infty} \sqrt{\xi_{\vec{k}}^2 + \left| \Gamma(\vec{k}) \Delta \right|^2} = \left| \Gamma(\vec{k}) \right|^2 \frac{|\Delta|^2}{2k^2} + \xi_{\vec{k}} + \mathcal{O}(k^{-4}). \quad (3.98)$$

waarbij de hyperbolische functies in de eerste stap zijn uitgeschreven naar exponenten en in de tweede stap gebruik gemaakt is van de taylorreeks $\sqrt{1+x} \approx 1 + \frac{x}{2}$ (die geldig is voor kleine x) en $\lim_{k \rightarrow \infty} (\xi_k) = k^2$. Met deze uitdrukking is het dus duidelijk dat voor grote k , de integraal in vgl. (3.97) naar nul gaat en dus convergeert.

Naast de gapvergelijking moeten ook de nummervergelijkingen (vgl. (3.86)) worden opgelost. De eerste nummervergelijking met vgl. (3.97) wordt:

$$n_{sp} = - \left. \frac{\partial \Omega(T, V, \mu, \zeta)}{\partial \mu} \right|_{T, V, \zeta} = - \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \left[\frac{\sinh(\beta E_{\vec{k}})}{\cosh(\beta E_{\vec{k}}) + \cosh(\beta \zeta)} \frac{\xi_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}} - 1 \right]. \quad (3.99)$$

Hierbij is gebruik gemaakt van vgl. (3.94) en van:

$$\frac{\partial f(E_{\vec{k}})}{\partial \mu} = \frac{\partial f(E_{\vec{k}})}{\partial E_{\vec{k}}} \frac{\partial E_{\vec{k}}}{\partial \mu} = - \frac{\partial f(E_{\vec{k}})}{\partial E_{\vec{k}}} \frac{\xi_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}}. \quad (3.100)$$

waarbij f een algemene functie is. De tweede nummervergelijking is eenvoudiger om op te lossen:

$$\delta n = - \left. \frac{\partial \Omega(T, V, \mu, \zeta)}{\partial \zeta} \right|_{T, V, \mu} = \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \left[\frac{\sinh(\beta E_{\vec{k}})}{\cosh(\beta E_{\vec{k}}) + \cosh(\beta \zeta)} \right], \quad (3.101)$$

hierbij is opnieuw gebruik gemaakt van vgl. (3.94). Aangezien er in natuurlijke eenheden wordt gewerkt van $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$ ligt het aantal deeltjes vast op $n = (3\pi^2)^{-1}$. Dit maakt dat beide nummervergelijkingen kunnen worden herschreven:

$$\frac{1}{3\pi^2} = \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \left[1 - \frac{\sinh(\beta E_{\vec{k}})}{\cosh(\beta E_{\vec{k}}) + \cosh(\beta \zeta)} \frac{\xi_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}} \right] \quad (3.102)$$

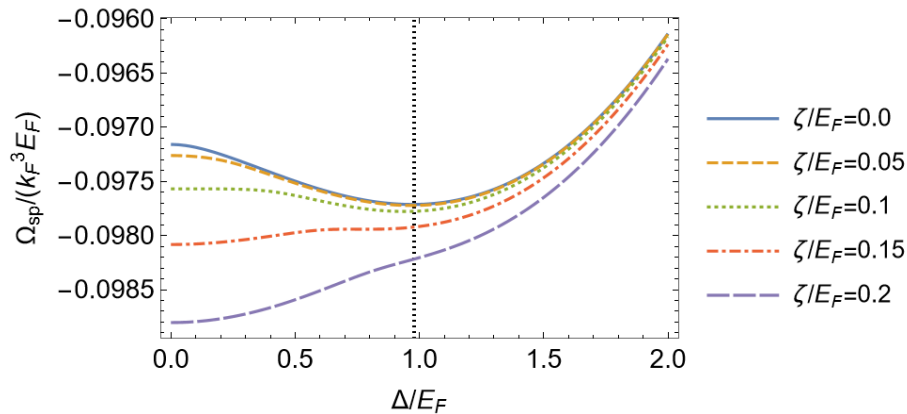
en

$$\frac{1}{3\pi^2} \frac{\delta n}{n} = \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \left[\frac{\sinh(\beta \zeta)}{\cosh(\beta E_{\vec{k}}) + \cosh(\beta \zeta)} \right]. \quad (3.103)$$

Deze twee vergelijkingen samen met de gap-vergelijking (vgl. (3.96)), leggen de volledige thermodynamica vast van het systeem. De eerste en tweede vergelijking is gekoppeld en leggen Δ en μ vast. De derde vergelijking legt ζ vast in functie van de spin-onbalans.

Dit stelsel aan gekoppelde integraalvergelijkingen is echter niet triviaal oplosbaar. In plaats van een bepaalde spin onbalans en een bepaald verstrooiingsvolume op te leggen en daaruit de chemische potentialen en Δ te bepalen, zal het omgekeerde worden gedaan. Er zullen verschillende waarden voor Δ en ζ worden gekozen als input en de corresponderende fysische grootheden zullen dan worden berekend met de integraalvergelijkingen. Hierdoor kan de chemische potentiaal μ , eerst worden bepaald met vgl. (3.102). Hierna kan het verstrooiingsvolume en ζ worden bepaald door de integralen in vgl. (3.96) en (3.103) uit te rekenen. De resultaten die hieronder worden getoond zijn berekend voor een potentiaal met $m = -1$. De $m = 0$ en $m = -1$ leveren hetzelfde resultaat.

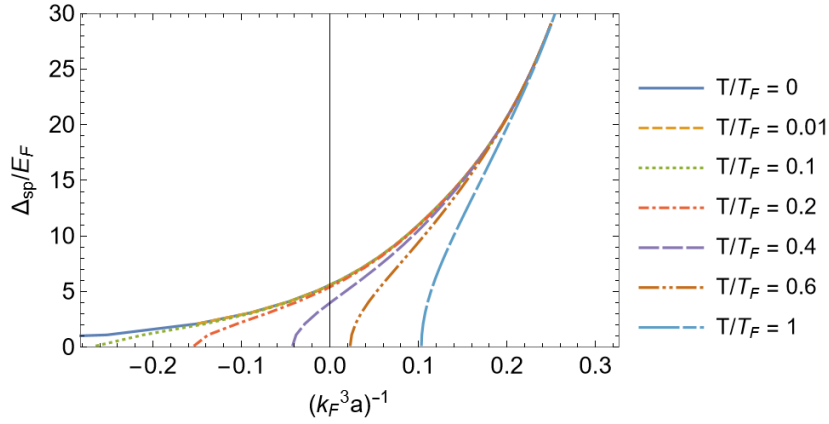
In figuur 3.2 is een voorbeeld gegeven van de vrije energie in functie van Δ . Hierop is ook de oplossing van de gapvergelijking geplot met een verticale stippellijn voor de drie kleinste waarden van ζ . Het valt op dat als de onbalans tussen spin op en spin neer (ζ) groter wordt, dat er een tweede minima ontstaat op $\Delta = 0$. Dit minima zal vanaf een kritische ζ kleiner zijn dan het originele minima. Hierdoor zal de minimale waarde van Δ gelijk worden aan nul, en zal er geen paarvorming optreden. Als ζ blijft toenemen wordt dit nog het enige minima.



Figuur 3.2: De zadelpunt vrije energie per volume eenheid (Ω_{sp}) in functie van (Δ), voor verschillende waarden van de chemische potentiaal ζ ($\zeta = 0$ komt overeen met een systeem waar evenveel spin op als spin neer fermionen zijn). De verticale stippellijn komt overeen met de minimale waarde van Ω_{sp} voor de drie kleinste ζ . De plot is gemaakt bij een temperatuur van $0,01T_F$, een chemische potentiaal (μ) van $0,94$ en het $m = 0$ kanaal.

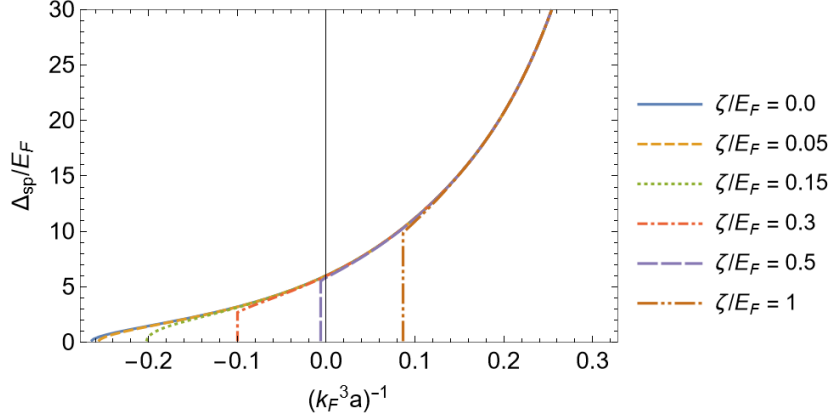
In figuur 3.3 is de zadelpuntsoplossing van Δ ($= \Delta_{sp}$) geplot in functie van het verstrooiingsvolume voor verschillende temperaturen. Hierbij komen de negatieve waarden van het verstrooiingsvolume overeen met het BCS gebied en de positieve waarden met het BEC gebied. Het is duidelijk dat voor positieve kleine verstrooiingsvolumes, de oplossing convergeert voor alle temperaturen. Voor grotere verstrooiingsvolume of negatieve waarden heeft de temperatuur wel een invloed en zullen te hoge temperaturen er voor zorgen dat de Δ_{sp}

nul wordt en er geen paarvorming zal optreden.



Figuur 3.3: De zadelpuntsoplossing van Δ_{sp} in functie van het inverse verstrooiingsvolume $((k_F^3 a)^{-1})$, voor verschillende temperaturen. De plot is gemaakt voor $k_0 = 1$ en $m = 1$.

In figuur 3.4 is Δ_{sp} geplot in functie van het verstrooiingsvolume voor verschillende temperaturen. Hierbij is een gelijkaardig effect zichtbaar als bij de temperatuur, alleen wordt Δ_{sp} plotseling nul (in de figuur is dit niet het geval omdat er gewerkt wordt bij $\beta = 10$). Dit was ook besloten bij het plotten van de vrije energie in functie van Δ_{sp} en volgt dus ook dezelfde logica.



Figuur 3.4: De zadelpuntsoplossing van Δ_{sp} in functie van het inverse verstrooiingsvolume $((k_F^3 a)^{-1})$, voor verschillende chemische potentialen ζ . De plot is gemaakt voor $k_0 = 1$, $m = 1$ en $T = 0, 1T_F$.

3.8.1 Temperatuur nul

De gapvergelijking en nummervergelijkingen zijn geldig bij eindige temperatuur, maar zijn numeriek niet stabiel voor temperatuur nul (of $\beta \rightarrow \infty$). In de gapvergelijkingen en de eerste

nummervergelijking is er maar één term waarin β voorkomt. Dus hierover kan simpelweg de limiet worden genomen:

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \left[\frac{\sinh(\beta E_{\vec{k}})}{\cosh(\beta E_{\vec{k}}) + \cosh(\beta \zeta)} \right] = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \left[\frac{\exp\{\beta E_{\vec{k}}\}}{\exp\{\beta E_{\vec{k}}\} + \exp\{\beta \zeta\}} \right] = \Theta(\zeta < E_{\vec{k}}). \quad (3.104)$$

In de tweede nummervergelijking is er een zeer gelijkaardige term waarover de limiet moet worden genomen:

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \left[\frac{\sinh(\beta \zeta)}{\cosh(\beta E_{\vec{k}}) + \cosh(\beta \zeta)} \right] = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \left[\frac{\exp\{\beta \zeta\}}{\exp\{\beta E_{\vec{k}}\} + \exp\{\beta \zeta\}} \right] = \Theta(\zeta > E_{\vec{k}}). \quad (3.105)$$

Dit maakt dat de gapvergelijking (vgl. (3.96)) en de eerste nummervergelijking (vgl. (3.102)) voor temperatuur nul kunnen geschreven worden als

$$-\frac{1}{8\pi(a_l k_F^3)k_0 b} = \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \Gamma^2(\vec{k}) \left(\frac{1}{2E_k} \Theta(\zeta < E_{\vec{k}}) - \frac{1}{2k^2} \right) \quad (3.106)$$

en

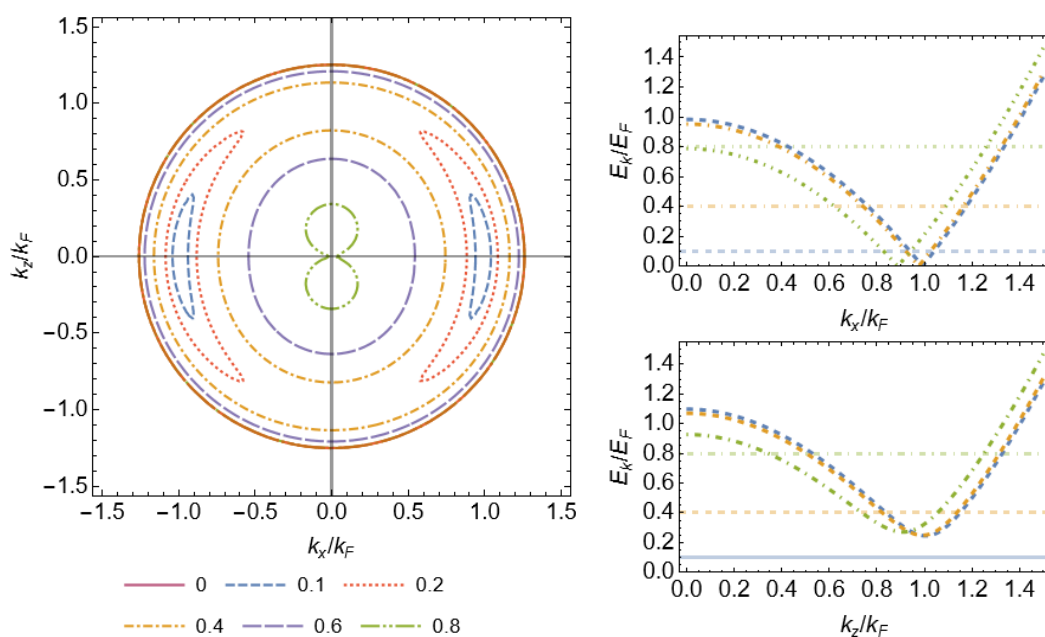
$$\frac{1}{3\pi^2} = \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \left\{ 1 - \Theta(\zeta < E_{\vec{k}}) \frac{\xi_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}} \right\}. \quad (3.107)$$

De tweede nummervergelijking (vgl. (3.103)) kan geschreven worden als

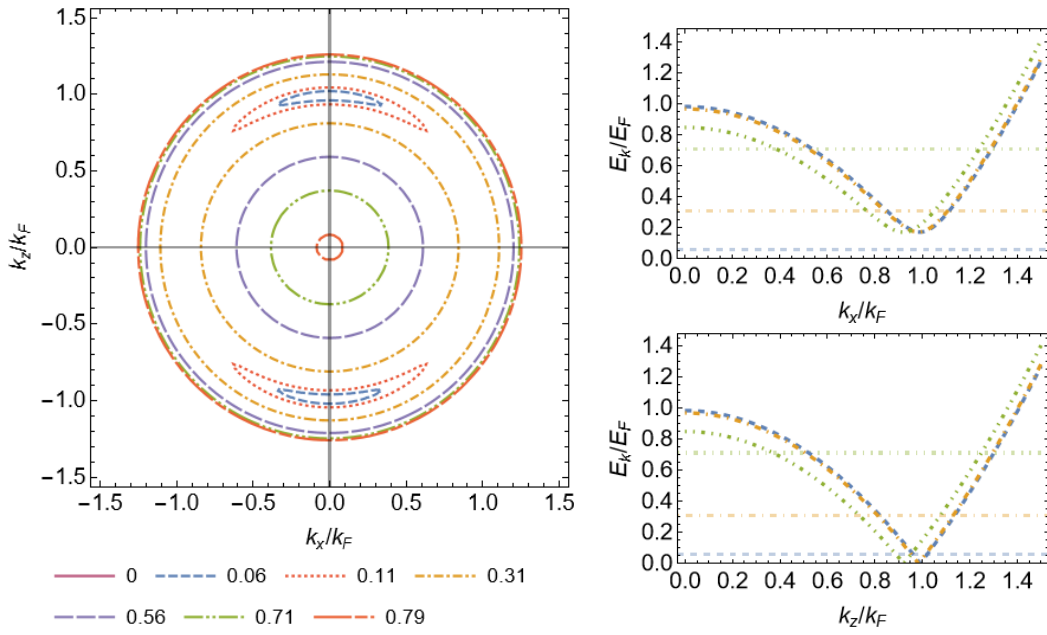
$$\frac{1}{3\pi^2} \frac{\delta n_{sp}}{n_{sp}} = \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \Theta(\zeta > E_{\vec{k}}). \quad (3.108)$$

Uit vgl. (3.106) volgt dat bij temperatuur nul, de onbalans alleen een effect zal hebben op Δ en nummervergelijking voor μ waarbij $(E_{\vec{k}})$ lager dan ζ . Dit kan grafisch worden weergegeven door plots te maken van $\zeta = E_{\vec{k}}$ waaruit duidelijk wordt waar de energie een effect zal hebben, deze zijn gegeven in figuren 3.5 en 3.6.

Tussen figuren 3.5 en 3.6 is de oriëntatie van de velden ook anders. Dit is logisch aangezien in de Bogoliubov energie de term $|\Delta \Gamma(\vec{k})|$ voorkomt waarbij $\Gamma(\vec{k}) = |\Gamma(k)Y_{1m}|$. Figuur 3.5, komt overeen met de bolfunctie $|Y_{10}|$, wat de vorm heeft van een p_z -orbitaal in de atomaire fysica, waardoor de energie maximaal is in de z -richting. De andere figuur komt overeen met de bolfunctie $|Y_{11}|$, wat de vorm heeft van een $p_x + ip_y$ orbitaal in de atomaire fysica, waardoor de energie maximaal is in het xy -vlak. In beide figuren is verondersteld dat $k_y = 0$, omdat de k_x en k_y richtingen equivalent zijn. De resultaten voor de bolfunctie $|Y_{1-1}|$ zijn hetzelfde als de resultaten voor $|Y_{11}|$.



Figuur 3.5: Een contourplot van $\zeta = E_{\vec{k}}$, waarbij E_k de Bogoliubov energie is bij $m = 0$, voor verschillende waarden van ζ (de waarden gegeven op de contours). Voor waarden waarbij $E_{\vec{k}} < \zeta$, is er een spin onbalans aanwezig. Buiten de laatste contour, is $E_{\vec{k}} > \zeta$. In de rechtse plots zijn doorsnedes gegeven van de contourplot voor een paar ζ 's. Hierop is de Bogoliubov energie geplott en is de bijhordende ζ geplott met een horizontale lijn.



Figuur 3.6: Een contourplot van $\zeta = E_{\vec{k}}$, waarbij E_k de Bogoliubov energie is bij $m = 1$, voor verschillende waarden van ζ (de waarden gegeven op de contours). Voor waarden waarbij $E_{\vec{k}} < \zeta$, is er een spin onbalans aanwezig. Buiten de laatste contour, is $E_{\vec{k}} > \zeta$. In de rechtse plots zijn doorsnedes gegeven van de contourplot voor een paar ζ 's. Hierop is de Bogoliubov energie geplott en is de bijhordende ζ geplott met een horizontale lijn.

Hoofdstuk 4

Gaussische fluctuaties

In de vorige sectie is de zadelpuntsbenadering gemaakt, hierbij is verondersteld dat alle paren gecondenseerd zijn in de $\vec{q} = 0$ en $m = 0$ toestand. Deze benadering kan echter verbeterd worden door fluctuatievelden in te voeren. Deze velden zorgen voor een kleine afwijking van de zadelpuntsbenadering. De berekeningen hiervan zal nog steeds analytisch worden uitgevoerd, maar zullen moeilijker worden. In sectie 4.1, zal een formule worden afgeleid om de euclidische actie te berekenen. In de secties daarna zal dit verder worden uitgewerkt tot de uiteindelijke actie bekomen wordt. Deze zal dan in hoofdstuk 5 worden gebruikt om de responsfuncties te berekenen.

4.1 Nambu spinoren voor Gaussische fluctuaties

4.1.1 Niet diagonale Greense functies

Zoals vermeld in de inleiding van dit hoofdstuk, zal de matrix $\mathbb{G}^{-1}$, niet langer orthogonaal zijn in k en n . De actie heeft dus de volgende vorm die ook gegeven is in vgl. (3.65):

$$\int \mathcal{D}\bar{\psi}_{\vec{k},n,\sigma} \mathcal{D}\psi_{\vec{k},n,\sigma} \exp \left\{ - \sum_{\vec{k},n} \sum_{\vec{k}',n'} \bar{\eta}_{\vec{k}',n'} \cdot \langle \vec{k}',n' | -\mathbb{G}^{-1} | \vec{k},n \rangle \cdot \eta_{\vec{k},n} \right\}. \quad (4.1)$$

Aangezien deze actie niet orthogonaal is, zal de afleiding opnieuw moet starten vanaf (3.64), hiermee kan de bovenstaande vergelijking herschreven worden tot:

$$\left[\prod_{\vec{k},n} (-1) \right] \int \mathcal{D}\bar{\eta}_{\vec{k},n} \mathcal{D}\eta_{\vec{k},n} \exp \left\{ - \sum_{\vec{k},n} \sum_{\vec{k}',n'} \bar{\eta}_{\vec{k}',n'} \cdot \langle \vec{k}',n' | -\mathbb{G}^{-1} | \vec{k},n \rangle \cdot \eta_{\vec{k},n} \right\}. \quad (4.2)$$

Deze eerste factor tussen vierkante haken zal worden geschreven als χ . De integraal kan net zoals hiervoor worden geïnterpreteerd als een $N \times N$ -matrices van 2×2 -matrices, wat neerkomt op:

$$\chi \int \mathcal{D}\bar{\eta}_{\vec{k},n} \mathcal{D}\eta_{\vec{k},n} \exp \left\{ - \sum_{\vec{k},n,j} \sum_{\vec{k}',n',j'} \bar{\eta}_{\vec{k}',n',j'} (-\mathbb{G}^{-1})_{\vec{k}',n',j';\vec{k},n,j} \eta_{\vec{k},n,j} \right\} = \chi \det (-\mathbb{G}^{-1}). \quad (4.3)$$

In verdere berekeningen zal blijken dat een uitkomst in exponentiële vorm handiger is, wat maakt dat de determinant zal worden geschreven als:

$$\det(-\mathbb{G}^{-1}) = \exp \left\{ \ln [\det(-\mathbb{G}^{-1})] \right\}. \quad (4.4)$$

Dit kan verder worden uitgewerkt door de determinant uit te schrijven als een product van de eigenwaarden van de matrix (λ_i) :

$$\exp \left\{ \ln [\det(-\mathbb{G}^{-1})] \right\} = \exp \left\{ \ln \left[- \prod_i \lambda_i \right] \right\} = \exp \left\{ \sum_i \ln [-\lambda_i] \right\} = \exp \left\{ \text{Tr} \ln [-D] \right\}. \quad (4.5)$$

Hierbij is $D = \text{diag}(\lambda_1 \dots \lambda_i \dots)$. In de laatste stap is gebruik gemaakt van het feit dat het logaritme van een diagonaalmatrix gelijk is aan dezelfde diagonaalmatrix waarvan het logaritme is genomen van elk element. Per definitie geldt ook dat er een matrix C bestaat waarvoor geldt dat

$$C = \ln [-D] \Leftrightarrow -D = \exp\{C\} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{C^n}{n!}. \quad (4.6)$$

En het spoor van deze uitdrukking is dus gelijk aan:

$$\text{Tr}(\ln[-D]) = \text{Tr}(C) = \text{Tr}(P^{-1}CP) \quad (4.7)$$

hieruit is het duidelijk dat

$$-D = \exp\{P^{-1}CP\} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(P^{-1}CP)^n}{n!} = 1 + P^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{C^n}{n!} P \Leftrightarrow -PDP^{-1} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{C^n}{n!} \quad (4.8)$$

en als P nu zodanig wordt gekozen dat de matrix $\mathbb{G}^{-1}$ gediagonaliseerd wordt naar D , dan volgt hieruit dat de $\text{Tr}(\ln[-D]) = \text{Tr}(P^{-1}CP) = \text{Tr}(\ln[-PDP^{-1}]) = \text{Tr}(\ln[-\mathbb{G}^{-1}])$. Dit kan samen met vgl. (4.3), (4.4) en (4.5) gebruikt worden om vgl. (4.1) te schrijven als:

$$\int \mathcal{D}\bar{\psi}_{\vec{k},n,\sigma} \mathcal{D}\psi_{\vec{k},n,\sigma} \exp \left\{ - \sum_{\vec{k},n,\vec{k}',n'} \bar{\eta}_{\vec{k}',n'} \cdot \langle \vec{k}',n' | -\mathbb{G}^{-1} | \vec{k},n \rangle \cdot \eta_{\vec{k},n} \right\} = \mathcal{X} \exp \left\{ \text{Tr} [\ln(-\mathbb{G}^{-1})] \right\}. \quad (4.9)$$

Hierbij is het spoor genomen over de σ , $\vec{k}$ en n . De laatste stap bestaat er dan in om dit terug in te vullen in vgl. (3.65), wat uiteindelijk leidt tot:

$$\mathcal{Z} = \mathcal{X} \int \mathcal{D}\bar{\Delta}_{\vec{q},m} \mathcal{D}\Delta_{\vec{q},m} \exp \left\{ \sum_{\vec{q},m} \frac{\bar{\Delta}_{\vec{q},m} \Delta_{\vec{q},m}}{g} + \text{Tr} [\ln(-\mathbb{G}^{-1})] \right\} \quad (4.10)$$

Hieruit volgt ook opnieuw de oplossing voor de zadelpuntsbenadering als $\mathbb{G}^{-1}$ wordt vervangen door $\mathbb{G}_{sp}^{-1}$ (uit vgl. (3.68)) en $\Delta_{\vec{q},m}$ door $\sqrt{\beta V} \delta(\vec{q}) \delta_{m,0} \Delta$:

$$\mathcal{Z}_{sp} = \mathcal{X} \exp \left\{ \frac{\beta V |\Delta|^2}{g} + \text{Tr} [\ln(-\mathbb{G}_{sp}^{-1})] \right\}. \quad (4.11)$$

De reden waarom dit opnieuw is aangehaald, zal verder duidelijk worden.

4.1.2 De veralgemeende Greense Functie

Om dit nu toe te passen op de actie in vgl. (3.57), dient net zoals bij de zadelpuntsbenadering de actie opnieuw te worden geschreven in functie van de Nambuspinoeren. Hiervoor moet eerst worden overgeschakeld naar een nieuwe labeling in de voorlaatste term:

$$\left\{ \begin{array}{l} \left\{ -\vec{k}_1, -n_1 \right\} = \left\{ \frac{q}{2} - \vec{k}, \frac{m}{2} - n \right\} \\ \left\{ \vec{k}_2, n_2 \right\} = \left\{ \frac{q}{2} + \vec{k}, \frac{m}{2} + n \right\} \end{array} \right\} \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} \left\{ \vec{q}, m \right\} = \left\{ \vec{k}_2 - \vec{k}_1, n_2 - n_1 \right\} \\ \left\{ \vec{k}, n \right\} = \left\{ (\vec{k}_1 + \vec{k}_2)/2, n_1 + n_2 \right\} \end{array} \right\} \quad (4.12)$$

De nieuwe labeling voor de laatste term is exact omgekeerd gedefinieerd $\{\vec{k}_1, n_1\} \leftrightarrow \{\vec{k}_2, n_2\}$. De tweede term kan op exact dezelfde manier worden herschreven als in vgl. (3.67). Wat dus maakt dat vgl. (3.57) kan worden herschreven tot:

$$\begin{aligned} Z = & \int \mathcal{D}\bar{\psi}_{\vec{k},n,\sigma} \int \mathcal{D}\psi_{\vec{k},n,\sigma} \int \mathcal{D}\bar{\Delta}_{\vec{q},m} \int \mathcal{D}\Delta_{\vec{q},m} \exp \left\{ - \sum_{\vec{q},m} \frac{\bar{\Delta}_{\vec{q},m} \Delta_{\vec{q},m}}{g} \right\} \\ & \times \left\{ - \sum_{\vec{k},n} \left[\bar{\psi}_{\vec{k},n,\uparrow} (-i\omega_n + k^2 - \mu_{\uparrow}) \psi_{\vec{k},n,\uparrow} + \psi_{-\vec{k},-n,\downarrow} (-i\omega_n - k^2 + \mu_{\downarrow}) \bar{\psi}_{-\vec{k},-n,\downarrow} \right] \right. \\ & + \sum_{\vec{k}_1,n_1} \sum_{\vec{k}_2,n_2} \frac{1}{\sqrt{\beta V}} \left[\Gamma^* \left(\frac{\vec{k}_1 + \vec{k}_2}{2} \right) \bar{\Delta}_{\vec{k}_2 - \vec{k}_1, n_2 - n_1} \psi_{-\vec{k}_1, -n_1, \downarrow} \psi_{\vec{k}_2, n_2, \uparrow} \right. \\ & \left. \left. + \Gamma \left(\frac{\vec{k}_1 + \vec{k}_2}{2} \right) \Delta_{\vec{k}_1 - \vec{k}_2, n_1 - n_2} \bar{\psi}_{\vec{k}_1, n_1, \uparrow} \bar{\psi}_{-\vec{k}_2, -n_2, \downarrow} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.13)$$

De actie kan nu geschreven worden in termen van de Nambu spinoren als

$$S = \sum_{\vec{k}_1, n_1} \sum_{\vec{k}_2, n_2} \bar{\eta}_{\vec{k}_1, n_1} \cdot \langle \vec{k}_1, n_1 | -\mathbb{G}^{-1} | \vec{k}_2, n_2 \rangle \cdot \eta_{\vec{k}_2, n_2}, \quad (4.14)$$

met

$$\langle \vec{k}_1, n_1 | -\mathbb{G}^{-1} | \vec{k}_2, n_2 \rangle = \begin{pmatrix} (-i\omega_n + k^2 - \mu_{\uparrow}) \delta(\vec{k}_1 - \vec{k}_2, n_1 - n_2) & -\frac{\Gamma((\vec{k}_1 + \vec{k}_2)/2)}{\sqrt{\beta V}} \Delta_{\vec{k}_1 - \vec{k}_2, n_1 - n_2} \\ -\frac{\Gamma^*((\vec{k}_1 + \vec{k}_2)/2)}{\sqrt{\beta V}} \bar{\Delta}_{\vec{k}_2 - \vec{k}_1, n_2 - n_1} & (i\omega_n - k^2 + \mu_{\downarrow}) \delta(\vec{k}_1 - \vec{k}_2, n_1 - n_2) \end{pmatrix} \quad (4.15)$$

en de Nambuspinoeren

$$\eta_{\vec{k}_2, n_2} = \begin{pmatrix} \psi_{\vec{k}_2, n_2, \uparrow} \\ \bar{\psi}_{-\vec{k}_2, -n_2, \downarrow} \end{pmatrix} \quad (4.16)$$

en

$$\bar{\eta}_{\vec{k}_1, n_1} = (\bar{\psi}_{\vec{k}_1, n_1, \uparrow} \quad \psi_{-\vec{k}_1, -n_1, \downarrow}). \quad (4.17)$$

De diagonaaltermen zijn exact hetzelfde als bij de zadelpuntsbenadering, maar nu zijn de diagonaalelementen niet langer orthogonaal in $\vec{k}$ en n .

4.1.3 Expansie van de fluctuaties

Zoals vermeld in de inleiding zullen nu ook Gaussische¹ fluctuaties worden ingevoerd. De meest conventionele manier om dit te doen is door:

$$\begin{cases} \Delta_{\vec{q},m} = \sqrt{\beta V} \delta(\vec{q}) \delta_{m,0} \Delta + \phi_{\vec{q},\vec{m}} \\ \bar{\Delta}_{\vec{q},m} = \sqrt{\beta V} \delta(\vec{q}) \delta_{m,0} \Delta^* + \bar{\phi}_{\vec{q},\vec{m}}. \end{cases} \quad (4.18)$$

In deze thesis zal er echter worden gewerkt met de hydrodynamische beschrijving waarbij de fluctuaties gedefinieerd zijn als

$$\begin{cases} \Delta_{\vec{q},m} = \sqrt{\beta V} \delta(\vec{q}) \delta_{m,0} \Delta + a_{\vec{q},m} + i \Delta \theta_{\vec{q},m} \\ \bar{\Delta}_{\vec{q},m} = \sqrt{\beta V} \delta(\vec{q}) \delta_{m,0} \Delta^* + a_{-\vec{q},-m} - i \Delta^* \theta_{-\vec{q},-m}. \end{cases} \quad (4.19)$$

Hierbij is ook $a_{\vec{q},m}^*$ en $\theta_{\vec{q},m}^*$ herschreven naar $a_{-\vec{q},-m}$ en $\theta_{-\vec{q},-m}$. Dit kan eenvoudig worden nagegaan door te kijken naar de Fouriertransformatie van $\Delta_{\vec{q},m}$ en daarvan het complex toegevoegde te nemen om $\bar{\Delta}_{\vec{q},m}$ te bekomen:

$$\bar{\Delta}_{\vec{q},m} = (\Delta_{\vec{q},m})^* = \left(\int_0^\beta d\tau \int d\vec{r} \frac{e^{i\varpi_m \tau - i\vec{q} \cdot \vec{x}}}{\sqrt{\beta V}} \Delta_{\vec{r},\tau} \right) = \int_0^\beta d\tau \int d\vec{r} \frac{e^{i(-\varpi_m) \tau - i(-\vec{q}) \cdot \vec{x}}}{\sqrt{\beta V}} \Delta_{\vec{r},\tau}^*. \quad (4.20)$$

waarbij duidelijk zichtbaar is dat $\vec{q} \rightarrow -\vec{q}$ en $m \rightarrow -m$ is gegaan. de velden a en θ worden geassocieerd met het amplitude en het fase veld. De reden hiervoor is dat in de echte ruimte en complexe tijd heeft $\Delta_{\vec{q},m}$ de vorm:

$$\Delta_{\vec{r},m} = (\Delta + a_{\vec{r},\tau}) e^{i\theta_{\vec{r},\tau}} \approx \Delta + i \Delta \theta_{\vec{r},\tau} + a_{\vec{r},\tau}. \quad (4.21)$$

Hierbij is de benadering gemaakt tot op eerste orde, dit zal lijden tot een kwadratische (Gaussische) actie. Dit invullen in vgl. 4.20, geeft dus direct (4.19). Vgl. (4.19) kan nu verder worden doorgevoerd in de toestandssom (vgl. (4.14)), wat leidt tot de Greense functie:

$$-\mathbb{G}^{-1} = -\mathbb{G}_{sp}^{-1} + \mathbb{F}. \quad (4.22)$$

Hierbij is de eerste term ongewijzigd tegenover de zadelpuntsvergelijking:

$$\langle \vec{k}', n' | -\mathbb{G}_{sp}^{-1} | \vec{k}, n \rangle = \langle \vec{k}, n | \vec{k}', n' \rangle \begin{pmatrix} -i\omega_n + k^2 - \mu_\uparrow & -\Gamma(\vec{k}) \Delta \\ -\Gamma^*(\vec{k}) \Delta^* & -i\omega_n - k^2 + \mu_\downarrow \end{pmatrix}, \quad (4.23)$$

de tweede matrix ($\mathbb{F}$) is echter wel nieuw en komt overeen met de Gaussische fluctuaties:

$$\langle \vec{k}_1, n_1 | \mathbb{F} | \vec{k}_2, n_2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{\beta V}} \begin{pmatrix} 0 & -\Gamma\left(\frac{\vec{k}_1 + \vec{k}_2}{2}\right) \phi_{\vec{k}_1 - \vec{k}_2, n_1 - n_2} \\ -\Gamma^*\left(\frac{\vec{k}_1 + \vec{k}_2}{2}\right) \bar{\phi}_{\vec{k}_2 - \vec{k}_1, n_2 - n_1} & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.24)$$

Hierbij is

$$\phi_{\vec{k}_1 - \vec{k}_2, n_1 - n_2} = a_{\vec{k}_1 - \vec{k}_2, n_1 - n_2} + i \Delta \theta_{\vec{k}_1 - \vec{k}_2, n_1 - n_2} \quad (4.25)$$

en

$$\bar{\phi}_{\vec{k}_2 - \vec{k}_1, n_2 - n_1} = a_{-(\vec{k}_2 - \vec{k}_1), -(n_2 - n_1)} - i \Delta^* \theta_{-(\vec{k}_1 - \vec{k}_2), -(n_1 - n_2)}. \quad (4.26)$$

¹Dit verwijst naar de benadering dat maximaal kwadratische termen in f fluctuaties zullen worden behouden.

Dit is gedaan om de notatie handelbaar te houden en de velden ϕ zullen op het einde terug worden gesubstitueerd met de a en θ velden. Het logaritme van $-\mathbb{G}^{-1} = -\mathbb{G}_{sp}^{-1} + \mathbb{F}$ in vgl. (4.10) kan nu ook verder worden vereenvoudigd

$$\begin{aligned} \ln(-\mathbb{G}_{sp}^{-1} + \mathbb{F}) &= \ln[-\mathbb{G}_{sp}^{-1} + \mathbb{G}_{sp}^{-1}\mathbb{G}_{sp}\mathbb{F}] = \ln[-\mathbb{G}_{sp}^{-1}(\mathbb{I} - \mathbb{G}_{sp}\mathbb{F})] \\ &= \ln(-\mathbb{G}_{sp}^{-1}) + \ln(\mathbb{I} - \mathbb{G}_{sp}\mathbb{F}) \approx \ln(-\mathbb{G}_{sp}^{-1}) + \left(-\mathbb{G}_{sp}\mathbb{F} - \frac{1}{2}\mathbb{G}_{sp}\mathbb{F}\mathbb{G}_{sp}\mathbb{F}\right). \end{aligned} \quad (4.27)$$

In de laatste stap is aangenomen dat de elementen van $\mathbb{F}$ klein zijn waardoor de expansie $\ln(1+x) = x - \frac{x^2}{2}$ kan worden gebruikt. Dit samen met vgl. (4.18) invullen in vgl. (4.10) levert:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_q &= \mathcal{X} \int \mathcal{D}\bar{\phi}_{\vec{q},m} \mathcal{D}\phi_{\vec{q},m} \exp \left\{ \sum_{\vec{q},m} \frac{1}{g} \left(\sqrt{\beta V} \Delta^* \delta(\vec{q}) \delta_{m,0} + \bar{\phi}_{\vec{q},m} \right) \right. \\ &\quad \times \left(\sqrt{\beta V} \Delta \delta(\vec{q}) \delta_{m,0} + \phi_{\vec{q},m} \right) + \text{Tr} [\ln(-\mathbb{G}_{sp}^{-1})] - \text{Tr} [\ln(\mathbb{G}_{sp}\mathbb{F})] - \frac{1}{2} \text{Tr} [\mathbb{G}_{sp}\mathbb{F}\mathbb{G}_{sp}\mathbb{F}] \left. \right\}. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Het toepassen van de $\delta(\vec{q})$ en $\delta_{m,0}$, en deze termen samen met de tweede term buiten de padintegraal brengen (aangezien deze toch niet afhangen van ϕ of $\bar{\phi}$) levert:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_q &= \mathcal{X} \exp \left\{ \frac{\beta V |\Delta|^2}{g} + \text{Tr} [\ln(-\mathbb{G}_{sp}^{-1})] \right\} \\ &\quad \times \int \mathcal{D}\bar{\phi}_{\vec{q},m} \mathcal{D}\phi_{\vec{q},m} \exp \left\{ \frac{\sqrt{\beta V}}{g} \left(\Delta^* \phi_{\vec{0},0} + \Delta \bar{\phi}_{\vec{0},0} \right) + \sum_{\vec{q},m} \frac{\bar{\phi}_{\vec{q},m} \phi_{\vec{q},m}}{g} \right. \\ &\quad \left. - \text{Tr} [\ln(\mathbb{G}_{sp}\mathbb{F})] - \frac{1}{2} \text{Tr} [\mathbb{G}_{sp}\mathbb{F}\mathbb{G}_{sp}\mathbb{F}] \right\}. \end{aligned}$$

De eerste term komt overeen met de toestandssom van de zadelpuntsbenadering (vgl. (4.11)). De termen die linear zijn in de velden zullen verdwijnen. Dit is omdat deze termen overeenkomen met een eerste orde variatie van de zadelpuntsbenadering, en aangezien deze actie geminimaliseerd is, zal de eerste orde variatie wegvallen. Het eindresultaat wordt dus:

$$\mathcal{Z}_q = \mathcal{Z}_{sp} \int \mathcal{D}\bar{\phi}_{\vec{q},m} \mathcal{D}\phi_{\vec{q},m} \exp \left\{ \sum_{\vec{q},m} \frac{\bar{\phi}_{\vec{q},m} \phi_{\vec{q},m}}{g} - \frac{1}{2} \text{Tr} [\mathbb{G}_{sp}\mathbb{F}\mathbb{G}_{sp}\mathbb{F}] \right\} \quad (4.29)$$

Wat ook kan worden geschreven als $\mathcal{Z}_q \equiv \mathcal{Z}_{sp} \mathcal{Z}_f$, waar $\mathcal{Z}_f$ staat voor het deel van de toestandssom dat is veroorzaakt door de fluctuaties.

4.2 Toestandssom met Gaussische fluctuaties

Om de toestandssom te bepalen moet in vgl. (4.29) de term:

$$\text{Tr} [\mathbb{G}_{sp}\mathbb{F}\mathbb{G}_{sp}\mathbb{F}] = \sum_{\vec{k},n} \text{tr}_\sigma \left\langle \vec{k}, n | \mathbb{G}_{sp}\mathbb{F}\mathbb{G}_{sp}\mathbb{F} | \vec{k}, n \right\rangle, \quad (4.30)$$

worden uitgerekend. Deze kan worden uitgerekend door de eenheidsrelaties van de Fourier-transformatie in te voeren:

$$\langle \vec{k}, n | \mathbb{G}_{sp} \mathbb{F} \mathbb{G}_{sp} \mathbb{F} | \vec{k}, n \rangle = \sum_{\vec{k}', n'} \langle \vec{k}, n | \mathbb{G}_{sp} \mathbb{F} | \vec{k}', n' \rangle \langle \vec{k}', n' | \mathbb{G}_{sp} \mathbb{F} | \vec{k}, n \rangle. \quad (4.31)$$

Deze individuele matrices zijn eenvoudig te berekenen aangezien $\mathbb{G}_{sp}$ diagonaal is in $\vec{k}$ en n :

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}, n | \mathbb{G}_{sp} \mathbb{F} | \vec{k}', n' \rangle &= \sum_{\vec{k}'', n''} \langle \vec{k}, n | \mathbb{G}_{sp} | \vec{k}'', n \rangle \langle \vec{k}'', n | \mathbb{F} | \vec{k}', n' \rangle \\ &= \langle \vec{k}, n | \mathbb{G}_{sp} | \vec{k}, n \rangle \langle \vec{k}, n | \mathbb{F} | \vec{k}', n' \rangle. \end{aligned} \quad (4.32)$$

Hierin kunnen nu vgl. (4.23) en (4.24) worden ingevuld wat leidt tot:

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}, n | \mathbb{G}_{sp} \mathbb{F} | \vec{k}', n' \rangle &= \frac{1}{\sqrt{\beta V}} \frac{-1}{(i\omega_n + E_{\vec{k}} + \zeta)(i\omega_n - E_{\vec{k}} + \zeta)} \\ &\times \begin{pmatrix} i\omega_n + k^2 - \mu_{\downarrow} & -\Gamma(\vec{k})\Delta \\ -\Gamma^*(\vec{k})\Delta^* & i\omega_n - k^2 + \mu_{\uparrow} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & \Gamma\left(\frac{\vec{k}+\vec{k}'}{2}\right)\phi_{\vec{k}-\vec{k}', n-n'} \\ \Gamma^*\left(\frac{\vec{k}+\vec{k}'}{2}\right)\bar{\phi}_{\vec{k}'-\vec{k}, n'-n} & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.33)$$

wat gelijk is aan

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}, n | \mathbb{G}_{sp} \mathbb{F} | \vec{k}', n' \rangle &= \frac{1}{\sqrt{\beta V}} \frac{-1}{(i\omega_n + E_{\vec{k}} + \zeta)(i\omega_n - E_{\vec{k}} + \zeta)} \\ &\times \begin{pmatrix} -\Gamma(\vec{k})\Gamma^*\left(\frac{\vec{k}+\vec{k}'}{2}\right)\Delta\bar{\phi}_{\vec{k}'-\vec{k}, n'-n} & (i\omega_n + k^2 - \mu_{\downarrow})\Gamma\left(\frac{\vec{k}+\vec{k}'}{2}\right)\phi_{\vec{k}-\vec{k}', n-n'} \\ (i\omega_n - k^2 + \mu_{\uparrow})\Gamma^*\left(\frac{\vec{k}+\vec{k}'}{2}\right)\bar{\phi}_{\vec{k}'-\vec{k}, n'-n} & -\Gamma^*(\vec{k})\Gamma\left(\frac{\vec{k}+\vec{k}'}{2}\right)\Delta^*\phi_{\vec{k}-\vec{k}', n-n'} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.34)$$

Dit kan dan worden ingevuld in vgl. (4.31):

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}, n | \mathbb{G}_{sp} \mathbb{F} \mathbb{G}_{sp} \mathbb{F} | \vec{k}, n \rangle &= \frac{1}{\beta V} \sum_{\vec{k}', n'} \frac{1}{(i\omega_n + \zeta + E_{\vec{k}})(i\omega_n + \zeta - E_{\vec{k}})} \frac{1}{(i\omega_{n'} + \zeta + E_{\vec{k}'})(i\omega_{n'} + \zeta - E_{\vec{k}'})} \\ &\times \begin{pmatrix} -\Gamma(\vec{k})\Gamma^*\left(\frac{\vec{k}+\vec{k}'}{2}\right)\Delta\bar{\phi}_{\vec{k}'-\vec{k}, n'-n} & (i\omega_n + k^2 - \mu_{\downarrow})\Gamma\left(\frac{\vec{k}+\vec{k}'}{2}\right)\phi_{\vec{k}-\vec{k}', n-n'} \\ (i\omega_n - k^2 + \mu_{\uparrow})\Gamma^*\left(\frac{\vec{k}+\vec{k}'}{2}\right)\bar{\phi}_{\vec{k}'-\vec{k}, n'-n} & -\Gamma^*(\vec{k})\Gamma\left(\frac{\vec{k}+\vec{k}'}{2}\right)\Delta^*\phi_{\vec{k}-\vec{k}', n-n'} \end{pmatrix} \\ &\times \begin{pmatrix} -\Gamma(\vec{k}')\Gamma^*\left(\frac{\vec{k}+\vec{k}'}{2}\right)\Delta\bar{\phi}_{\vec{k}-\vec{k}', n-n'} & (i\omega_{n'} + k'^2 - \mu_{\downarrow})\Gamma\left(\frac{\vec{k}+\vec{k}'}{2}\right)\phi_{\vec{k}'-\vec{k}, n-n'} \\ (i\omega_{n'} - k'^2 + \mu_{\uparrow})\Gamma^*\left(\frac{\vec{k}+\vec{k}'}{2}\right)\bar{\phi}_{\vec{k}-\vec{k}', n-n'} & -\Gamma^*(\vec{k}')\Gamma\left(\frac{\vec{k}+\vec{k}'}{2}\right)\Delta^*\phi_{\vec{k}'-\vec{k}, n-n'} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.35)$$

We zijn echter alleen geïnteresseerd in de trace van deze grote matrix, en zullen dus ook enkel de termen op de diagonaal uitrekenen. Het (1,1)-element van de matrix is

$$\begin{aligned} \Gamma(\vec{k})\Gamma(\vec{k}') \left[\Gamma^* \left(\frac{\vec{k} + \vec{k}'}{2} \right) \right]^2 \Delta^2 \bar{\phi}_{\vec{k}' - \vec{k}, n' - n} \bar{\phi}_{\vec{k} - \vec{k}', n - n'} \\ + \left| \Gamma \left(\frac{\vec{k} + \vec{k}'}{2} \right) \right|^2 (i\omega_n + k^2 - \mu_{\downarrow}) \phi_{\vec{k} - \vec{k}', n' - n} (i\omega_{n'} - k'^2 + \mu_{\uparrow}) \bar{\phi}_{\vec{k} - \vec{k}', n - n'}, \end{aligned} \quad (4.36)$$

en het (2,2)-element van de matrix is

$$\begin{aligned} \left| \Gamma \left(\frac{\vec{k} + \vec{k}'}{2} \right) \right|^2 (i\omega_n - k^2 + \mu_{\uparrow}) \bar{\phi}_{\vec{k}' - \vec{k}, n' - n} (i\omega_{n'} + k'^2 - \mu_{\downarrow}) \phi_{\vec{k}' - \vec{k}, n' - n} \\ + \Gamma^*(\vec{k})\Gamma^*(\vec{k}') \left[\Gamma \left(\frac{\vec{k} + \vec{k}'}{2} \right) \right]^2 (\Delta^*)^2 \phi_{\vec{k} - \vec{k}', n - n'} \phi_{\vec{k}' - \vec{k}, n' - n}. \end{aligned} \quad (4.37)$$

Deze twee uitdrukkingen samen met de voorterm in vgl. (4.35), kunnen nu worden gebruikt om de trace te berekenen in (vgl. (4.30)). Vooraleer dit te doen worden er een aantal nieuwe notaties ingevoerd om de berekeningen handelbaar te houden:

$$(i\omega_n + k^2 - \mu_{\downarrow}) = (i\omega_n + \xi_{\vec{k}} + \zeta), \quad (4.38)$$

$$(i\omega_n - k^2 + \mu_{\uparrow}) = (i\omega_n - \xi_{\vec{k}} + \zeta) \quad (4.39)$$

waarbij $\xi_{\vec{k}} = k^2 - \mu$ de energie is van een vrij atoom. Verder wordt $\vec{q}$ en m geherdefinieerd door:

$$\begin{cases} \vec{q} = \vec{k} - \vec{k}' \rightarrow \vec{k} = \vec{q} + \vec{k}' \\ m = n - n' \rightarrow n = m + n' \end{cases} \quad (4.40)$$

Dit is uiteraard niets anders dan de definitie in vlg. (4.12), wat ineens aantoonst dat $\vec{q}$ en m een bosonisch karakter hebben. Een laatste nieuwe notatie die wordt geïntroduceerd is:

$$i\nu_{m+n} = i\varpi_m + i\omega_n + \zeta, \quad (4.41)$$

In deze uitdrukking komt m overeen met de bosonische Matsubara sommatie en n met de Fermionische. Dit alles invoeren in vgl. (4.35), en de trace nemen over alle verschillende

variabelen levert uiteindelijk

$$\begin{aligned}
& \sum_{\vec{k}, n} \text{Tr}_\sigma \left\langle \vec{k}, n \left| \mathbb{G}_{sp} \mathbb{F} \mathbb{G}_{sp} \mathbb{F} \right| \vec{k}, n \right\rangle \\
&= \frac{1}{\beta V} \sum_{\vec{q}, m} \sum_{\vec{k}, n} \frac{1}{\left(i\nu_{m+n} + E_{\vec{q}+\vec{k}} \right) \left(i\nu_{m+n} - E_{\vec{q}+\vec{k}} \right)} \frac{1}{\left(i\nu_n + E_{\vec{k}} \right) \left(i\nu_n - E_{\vec{k}} \right)} \\
&\times \left[\Gamma(\vec{k}) \Gamma(\vec{k} + \vec{q}) \left[\Gamma^* \left(\vec{k} + \frac{\vec{q}}{2} \right) \right]^2 \Delta^2 \bar{\phi}_{-\vec{q}, -m} \bar{\phi}_{\vec{q}, m} \right. \\
&+ \left(i\nu_{m+n} + \xi_{\vec{q}+\vec{k}} \right) \left(i\nu_n - \xi_{\vec{k}} \right) \left| \Gamma \left(\vec{k} + \frac{\vec{q}}{2} \right) \right|^2 \phi_{\vec{q}, m} \bar{\phi}_{\vec{q}, m} \\
&+ \left(i\nu_{m+n} - \xi_{\vec{q}+\vec{k}} \right) \left(i\nu_n + \xi_{\vec{k}} \right) \left| \Gamma \left(\vec{k} + \frac{\vec{q}}{2} \right) \right|^2 \bar{\phi}_{-\vec{q}, -m} \phi_{-\vec{q}, -m} \\
&\left. + (\Delta^*)^2 \Gamma^*(\vec{k}) \Gamma^*(\vec{k} + \vec{q}) \left[\Gamma \left(\vec{k} + \frac{\vec{q}}{2} \right) \right]^2 \phi_{\vec{q}, m} \phi_{-\vec{q}, -m} \right], \tag{4.42}
\end{aligned}$$

Hierbij zijn alle accenten weggelaten. De volgende stap bestaat er nu in om de Matsubara sommatie over n uit te rekenen.

4.3 Fermionische Matsubara som

De fermionische Matsubara som in vgl. (4.42) kan worden berekend met de standaard formule²:

$$\frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(i\omega_n) = \sum_{\substack{\text{Polen } z_j \\ \text{van } f}} \text{Res}_{z=z_j} [f(z) n_F(z)], \tag{4.43}$$

waarbij f een algemene functie is en n_F de Fermi-Dirac distributie. Vgl. (4.42) is reeds in een vorm geschreven waar de polen direct zichtbaar zijn. Ze zijn allen van eerste orde wat het residu berekenen zeer eenvoudig maakt:

$$\text{Res}_{z=z_j} [f(z) n_F(z)] = (z - z_j) f(z_j) n_F(z_j), \tag{4.44}$$

waarbij de polen overeenkomen met

$$z_j = \left\{ -i\omega_m - E_{\vec{q}+\vec{k}}, -i\omega_m + E_{\vec{q}+\vec{k}}, E_{\vec{k}}, -E_{\vec{k}} \right\}. \tag{4.45}$$

Aangezien de eerste en laatste $i\omega_n$ nergens anders voorkomt in de vergelijking, zal voor deze termen tijdelijk alleen de eerste lijn uit vgl. (4.42) volledig worden uitgeschreven en de rest zal worden geschreven als $[\dots \vec{k} \dots]$:

$$\frac{1}{\beta V} \sum_{\vec{k}, n} \frac{1}{\left(i\nu_{m+n} + E_{\vec{q}+\vec{k}} \right) \left(i\nu_{m+n} - E_{\vec{q}+\vec{k}} \right)} \frac{1}{\left(i\nu_n + E_{\vec{k}} \right) \left(i\nu_n - E_{\vec{k}} \right)} [\dots \vec{k} \dots]. \tag{4.46}$$

²Die geldig is als $f(z)$ gelijk of sneller naar nul gaat dan z^{-2} voor grote z .

De residu stelling hierop toepassen levert:

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \left(\frac{1}{\exp\{-\beta(\zeta + E_{\vec{k}})\} + 1} \frac{1}{(i\varpi_m - E_{\vec{k}} + E_{\vec{q}+\vec{k}})(i\varpi_m - E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}+\vec{q}}) - 2E_{\vec{k}}} \frac{1}{-2E_{\vec{k}}} \right. \\
& + \frac{1}{\exp\{\beta(-\zeta + E_{\vec{k}})\} + 1} \frac{1}{(i\varpi_m + E_{\vec{k}} + E_{\vec{q}+\vec{k}})(i\varpi_m + E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}+\vec{q}}) - 2E_{\vec{k}}} \frac{1}{2E_{\vec{k}}} \\
& + \frac{1}{\exp\{\beta(-\zeta - i\varpi_m + E_{\vec{q}+\vec{k}})\} + 1} \frac{1}{2E_{\vec{q}+\vec{k}}} \frac{1}{(-i\varpi_m + E_{\vec{q}+\vec{k}} + E_{\vec{k}})(-i\varpi_m + E_{\vec{k}+\vec{q}} - E_{\vec{k}})} \\
& + \left. \frac{1}{\exp\{\beta(-\zeta - i\varpi_m - E_{\vec{q}+\vec{k}})\} + 1} \frac{1}{-2E_{\vec{q}+\vec{k}}} \frac{1}{(-i\varpi_m - E_{\vec{q}+\vec{k}} + E_{\vec{k}})(-i\varpi_m - E_{\vec{k}+\vec{q}} - E_{\vec{k}})} \right) \\
& \times [\dots \vec{k} \dots]. \tag{4.47}
\end{aligned}$$

De twee laatste termen kunnen verder worden uitgeschreven door gebruik te maken van $\exp\{i\varpi_m\beta\} = \exp\{i2\pi m\} = 1$ en door een herlabeling van de sommatie index door $\vec{k} \rightarrow -\vec{k} - \vec{q}$ waarbij ineens zal worden rekening gehouden met $E_{-\vec{k}} = E_{\vec{k}}$:

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \left(\frac{1}{\exp\{\beta(-\zeta + E_{\vec{k}})\} + 1} \frac{1}{E_{\vec{k}}} \frac{1}{-i\varpi_m + E_{\vec{k}} + E_{\vec{k}+\vec{q}}} \frac{1}{-i\varpi_m + E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}+\vec{q}}} \right. \\
& + \left. \frac{1}{\exp\{-\beta(\zeta + E_{\vec{k}})\} + 1} \frac{1}{-E_{\vec{k}}} \frac{1}{-i\varpi_m - E_{\vec{k}} + E_{\vec{k}+\vec{q}}} \frac{1}{-i\varpi_m - E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}+\vec{q}}} \right) [\dots - \vec{k} - \vec{q} \dots]. \tag{4.48}
\end{aligned}$$

De $[\dots - \vec{k} - \vec{q} \dots]$ voor de eerste term in vgl. (4.42) is eenvoudig uit te werken:

$$\begin{aligned}
& \Gamma(\vec{k})\Gamma(\vec{k} + \vec{q}) \left[\Gamma^* \left(\vec{k} + \frac{\vec{q}}{2} \right) \right]^2 \xrightarrow{\vec{k} \rightarrow -\vec{k} - \vec{q}} \Gamma(-\vec{k} - \vec{q})\Gamma(-\vec{k}) \left[\Gamma^* \left(-\vec{k} - \frac{\vec{q}}{2} \right) \right]^2 \\
& = \Gamma(\vec{k})\Gamma(\vec{k} + \vec{q}) \left[\Gamma^* \left(\vec{k} + \frac{\vec{q}}{2} \right) \right]^2, \tag{4.49}
\end{aligned}$$

waarbij is gebruik gemaakt van $\Gamma(-\vec{k}) = -\Gamma(\vec{k})$. Voor de laatste term in (4.42) is dit exact hetzelfde maar zijn de uitdrukkingen complex geconjugueerd. De twee laatste termen in vgl. (4.47) substitueren met vgl. (4.48) levert dan tenslotte:

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \left[\left(\frac{1}{\exp\{-\beta(\zeta + E_{\vec{k}})\} + 1} - \frac{1}{\exp\{\beta(-\zeta + E_{\vec{k}})\} + 1} \right) \frac{1}{2E_{\vec{k}}} [\dots \vec{k} \dots] \right. \\
& \times \left. \left(\frac{1}{(i\varpi_m + E_{\vec{q}+\vec{k}} - E_{\vec{k}})(i\varpi_m - E_{\vec{k}+\vec{q}} - E_{\vec{k}})} + \frac{1}{(i\varpi_m + E_{\vec{k}} + E_{\vec{q}+\vec{k}})(i\varpi_m + E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}+\vec{q}})} \right) \right]. \tag{4.50}
\end{aligned}$$

De derde en vierde term kunnen op een gelijkaardige manier afgeleid worden, deze termen zijn binnen de vierkante haakjes echter wel afhankelijk van n en dus de ganse term

$$\frac{1}{\beta V} \sum_{\vec{k}, n} \frac{\left(i\nu_{m+n} \mp \xi_{\vec{q}+\vec{k}} \right) (i\nu_n \pm \xi_{\vec{k}}) \left| \Gamma\left(\vec{k} + \frac{\vec{q}}{2}\right) \right|^2}{\left(i\nu_{m+n} + E_{\vec{q}+\vec{k}} \right) \left(i\nu_{m+n} - E_{\vec{q}+\vec{k}} \right) (i\nu_n + E_{\vec{k}}) (i\nu_n - E_{\vec{k}})}. \quad (4.51)$$

zal hier dus worden besproken. De residustelling toepassen levert:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \left(\frac{1}{\exp\{-\beta(\zeta + E_{\vec{k}})\} + 1} \frac{(i\varpi_m - E_{\vec{k}} \mp \xi_{\vec{q}+\vec{k}})(-E_{\vec{k}} \pm \xi_{\vec{k}})}{(i\varpi_m - E_{\vec{k}} + E_{\vec{q}+\vec{k}})(i\varpi_m - E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}+\vec{q}})} \frac{1}{-2E_{\vec{k}}} \right. \\ & + \frac{1}{\exp\{\beta(-\zeta + E_{\vec{k}})\} + 1} \frac{(i\varpi_m + E_{\vec{k}} \mp \xi_{\vec{q}+\vec{k}})(E_{\vec{k}} \pm \xi_{\vec{k}})}{(i\varpi_m + E_{\vec{k}} + E_{\vec{q}+\vec{k}})(i\varpi_m + E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}+\vec{q}})} \frac{1}{2E_{\vec{k}}} \\ & + \frac{1}{\exp\{\beta(-\zeta - i\varpi_m + E_{\vec{q}+\vec{k}})\} + 1} \frac{1}{2E_{\vec{q}+\vec{k}}} \frac{(E_{\vec{k}+\vec{q}} \mp \xi_{\vec{q}+\vec{k}})(-i\varpi_m + E_{\vec{k}+\vec{q}} \pm \xi_{\vec{k}})}{(-i\varpi_m + E_{\vec{q}+\vec{k}} + E_{\vec{k}})(-i\varpi_m + E_{\vec{k}+\vec{q}} - E_{\vec{k}})} \\ & + \frac{1}{\exp\{\beta(-\zeta - i\varpi_m - E_{\vec{q}+\vec{k}})\} + 1} \frac{1}{-2E_{\vec{q}+\vec{k}}} \frac{(-E_{\vec{k}+\vec{q}} \mp \xi_{\vec{q}+\vec{k}})(-i\varpi_m - E_{\vec{k}+\vec{q}} \pm \xi_{\vec{k}})}{(-i\varpi_m - E_{\vec{q}+\vec{k}} + E_{\vec{k}})(-i\varpi_m - E_{\vec{k}+\vec{q}} - E_{\vec{k}})} \\ & \left. \times \right) \left| \Gamma\left(\vec{k} + \frac{\vec{q}}{2}\right) \right|^2. \end{aligned} \quad (4.52)$$

De laatste twee termen kunnen op dezelfde manier behandeld worden:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \left(\frac{1}{\exp\{\beta(-\zeta + E_{\vec{k}})\} + 1} \frac{1}{2E_{\vec{k}}} \frac{(E_{\vec{k}} \mp \xi_{\vec{k}})(-i\varpi_m + E_{\vec{k}} \pm \xi_{\vec{k}+\vec{q}})}{(-i\varpi_m + E_{\vec{k}} + E_{\vec{k}+\vec{q}})(-i\varpi_m + E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}+\vec{q}})} \right. \\ & \left. \times \frac{1}{\exp\{-\beta(\zeta + E_{\vec{k}})\} + 1} \frac{1}{-2E_{\vec{k}}} \frac{(-E_{\vec{k}} \mp \xi_{\vec{k}})(-i\varpi_m - E_{\vec{k}} \pm \xi_{\vec{k}+\vec{q}})}{(-i\varpi_m - E_{\vec{k}} + E_{\vec{k}+\vec{q}})(-i\varpi_m - E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}+\vec{q}})} \right) \left| \Gamma\left(\vec{k} + \frac{\vec{q}}{2}\right) \right|^2. \end{aligned} \quad (4.53)$$

Hierbij is gebruik gemaakt van $\left| \Gamma\left(\vec{k} + \frac{\vec{q}}{2}\right) \right|^2$ niet wijzigt bij de substituties. Deze uitdrukking kan nu de laatste twee termen in vgl. (4.52) vervangen, wat leidt tot:

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \left[\left(\frac{1}{\exp\{-\beta(\zeta + E_{\vec{k}})\} + 1} - \frac{1}{\exp\{\beta(-\zeta + E_{\vec{k}})\} + 1} \right) \frac{1}{2E_{\vec{k}}} \left| \Gamma\left(\vec{k} + \frac{\vec{q}}{2}\right) \right|^2 \right. \\ & \left. \times \left(\frac{(i\varpi_m - E_{\vec{k}} \mp \xi_{\vec{q}+\vec{k}})(-E_{\vec{k}} \pm \xi_{\vec{k}})}{(i\varpi_m - E_{\vec{k}} + E_{\vec{q}+\vec{k}})(i\varpi_m - E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}+\vec{q}})} + \frac{(i\varpi_m + E_{\vec{k}} \mp \xi_{\vec{q}+\vec{k}})(E_{\vec{k}} \pm \xi_{\vec{k}})}{(i\varpi_m + E_{\vec{k}} + E_{\vec{q}+\vec{k}})(i\varpi_m + E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}+\vec{q}})} \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.54)$$

In zowel vgl. (4.50) en (4.54) kan de uitdrukking nog worden vereenvoudigd met de relatie³:

$$\left(\frac{1}{\exp\{-\beta(\zeta + E_{\vec{k}})\} + 1} - \frac{1}{\exp\{\beta(-\zeta + E_{\vec{k}})\} + 1} \right) = \frac{\sinh(\beta E_{\vec{k}})}{\cosh(\beta E_{\vec{k}}) + \cosh(\beta \zeta)}. \quad (4.55)$$

³Dit kan zeer simpel worden nagegaan door de hyperbolische functies in exponentiële vorm te schrijven.

Dit samen met vgl. (4.50), (4.49) en (4.54), kan worden gebruikt om vgl. (4.42) te herschrijven tot:

$$\begin{aligned} & \sum_{\vec{k}, n} \text{Tr}_\sigma \left\langle \vec{k}, n \left| \mathbb{G}_{sp} \mathbb{F} \mathbb{G}_{sp} \mathbb{F} \right| \vec{k}, n \right\rangle \\ &= \sum_{\vec{q}, m} \left[M_{12} \bar{\phi}_{-\vec{q}, -m} \bar{\phi}_{\vec{q}, m} + M_{22} \phi_{\vec{q}, m} \bar{\phi}_{\vec{q}, m} + M_{11} \bar{\phi}_{-\vec{q}, -m} \phi_{-\vec{q}, -m} + M_{21} \phi_{\vec{q}, m} \phi_{-\vec{q}, -m} \right], \end{aligned} \quad (4.56)$$

met

$$\begin{aligned} M_{12} &= \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{2E_{\vec{k}}} \frac{\sinh(\beta E_{\vec{k}})}{\cosh(\beta E_{\vec{k}}) + \cosh(\beta \zeta)} \Gamma(\vec{k}) \Gamma(\vec{k} + \vec{q}) \left[\Gamma^* \left(\vec{k} + \frac{\vec{q}}{2} \right) \right]^2 \Delta^2 \\ &\times \left(\frac{1}{(i\varpi_m + E_{\vec{q}+\vec{k}} - E_{\vec{k}})(i\varpi_m - E_{\vec{k}+\vec{q}} - E_{\vec{k}})} + \frac{1}{(i\varpi_m + E_{\vec{k}} + E_{\vec{q}+\vec{k}})(i\varpi_m + E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}+\vec{q}})} \right) \\ M_{22} &= -\frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{2E_{\vec{k}}} \frac{\sinh(\beta E_{\vec{k}})}{\cosh(\beta E_{\vec{k}}) + \cosh(\beta \zeta)} \left| \Gamma \left(\vec{k} + \frac{\vec{q}}{2} \right) \right|^2 \\ &\times \left(\frac{(i\varpi_m - E_{\vec{k}} + \xi_{\vec{q}+\vec{k}})(-E_{\vec{k}} - \xi_{\vec{k}})}{(i\varpi_m - E_{\vec{k}} + E_{\vec{q}+\vec{k}})(i\varpi_m - E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}+\vec{q}})} + \frac{(i\varpi_m + E_{\vec{k}} + \xi_{\vec{q}+\vec{k}})(E_{\vec{k}} - \xi_{\vec{k}})}{(i\varpi_m + E_{\vec{k}} + E_{\vec{q}+\vec{k}})(i\varpi_m + E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}+\vec{q}})} \right) \\ M_{11} &= -\frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{2E_{\vec{k}}} \frac{\sinh(\beta E_{\vec{k}})}{\cosh(\beta E_{\vec{k}}) + \cosh(\beta \zeta)} \left| \Gamma \left(\vec{k} + \frac{\vec{q}}{2} \right) \right|^2 \\ &\times \left(\frac{(i\varpi_m - E_{\vec{k}} - \xi_{\vec{q}+\vec{k}})(-E_{\vec{k}} + \xi_{\vec{k}})}{(i\varpi_m - E_{\vec{k}} + E_{\vec{q}+\vec{k}})(i\varpi_m - E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}+\vec{q}})} + \frac{(i\varpi_m + E_{\vec{k}} - \xi_{\vec{q}+\vec{k}})(E_{\vec{k}} + \xi_{\vec{k}})}{(i\varpi_m + E_{\vec{k}} + E_{\vec{q}+\vec{k}})(i\varpi_m + E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}+\vec{q}})} \right) \\ M_{21} &= \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{2E_{\vec{k}}} \frac{\sinh(\beta E_{\vec{k}})}{\cosh(\beta E_{\vec{k}}) + \cosh(\beta \zeta)} \Gamma^*(\vec{k}) \Gamma^*(\vec{k} + \vec{q}) \left[\Gamma \left(\vec{k} + \frac{\vec{q}}{2} \right) \right]^2 (\Delta^*)^2 \\ &\times \left(\frac{1}{(i\varpi_m + E_{\vec{q}+\vec{k}} - E_{\vec{k}})(i\varpi_m - E_{\vec{k}+\vec{q}} - E_{\vec{k}})} + \frac{1}{(i\varpi_m + E_{\vec{k}} + E_{\vec{q}+\vec{k}})(i\varpi_m + E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}+\vec{q}})} \right). \end{aligned} \quad (4.57)$$

Deze notatie is uiteraard geen toeval en komt overeen met matrixelementen voor s -golf superfluïda als $\Gamma = 1$ [57]. Om een overzichtelijkere uitdrukking te verkrijgen, zullen deze termen nog worden herschreven. Dit zal gedaan worden door alle breuken eerst te splitsen in partieelbreuken. Hierna zal nogmaals een herindexering van de sommatie over $\vec{k}$ worden doorgevoerd.

4.4 Scheiden in partieelbreuken

De verschillende termen in vgl. (4.57) kunnen relatief eenvoudig worden gesplitst in partieelbreuken. Voor de M_{12} en M_{21} is dit zeer eenvoudig, de eerste term tussen ronde haken levert:

$$\frac{1}{(i\varpi_m + E_{\vec{q}+\vec{k}} - E_{\vec{k}})(i\varpi_m - E_{\vec{k}+\vec{q}} - E_{\vec{k}})} = \frac{a}{(i\varpi_m + E_{\vec{q}+\vec{k}} - E_{\vec{k}})} + \frac{b}{(i\varpi_m - E_{\vec{k}+\vec{q}} - E_{\vec{k}})} \quad (4.58)$$

en dus als verondersteld wordt dat $a = -b$ levert dit

$$-a = b = \frac{1}{2E_{\vec{k}+\vec{q}}}. \quad (4.59)$$

Waardoor het resultaat gelijk is aan:

$$\frac{1}{(i\varpi_m + E_{\vec{q}+\vec{k}} - E_{\vec{k}})(i\varpi_m - E_{\vec{k}+\vec{q}} - E_{\vec{k}})} = \frac{-1}{2E_{\vec{k}+\vec{q}}(i\varpi_m + E_{\vec{q}+\vec{k}} - E_{\vec{k}})} + \frac{1}{2E_{\vec{k}+\vec{q}}(i\varpi_m - E_{\vec{k}+\vec{q}} - E_{\vec{k}})}. \quad (4.60)$$

Aangezien dit zulke triviale berekeningen zijn, zal die niet zo uitgebreid worden afgeleid voor elke breuk. De tweede term voor M_{12} en M_{21} wordt

$$\frac{1}{(i\varpi_m + E_{\vec{k}} + E_{\vec{q}+\vec{k}})(i\varpi_m + E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}+\vec{q}})} = \frac{-1}{2E_{\vec{k}+\vec{q}}(i\varpi_m + E_{\vec{k}} + E_{\vec{q}+\vec{k}})} + \frac{1}{2E_{\vec{k}+\vec{q}}(i\varpi_m + E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}+\vec{q}})}. \quad (4.61)$$

De eerste term van respectievelijk M_{11} en M_{22} wordt:

$$\frac{(i\varpi_m - E_{\vec{k}} \mp \xi_{\vec{q}+\vec{k}})(-E_{\vec{k}} \pm \xi_{\vec{k}})}{(i\varpi_m - E_{\vec{k}} + E_{\vec{q}+\vec{k}})(i\varpi_m - E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}+\vec{q}})} = \frac{(-E_{\vec{k}} \pm \xi_{\vec{k}})(E_{\vec{k}+\vec{q}} \pm \xi_{\vec{k}+\vec{q}})}{2E_{\vec{k}+\vec{q}}(i\varpi_m - E_{\vec{k}} + E_{\vec{q}+\vec{k}})} + \frac{(-E_{\vec{k}} \pm \xi_{\vec{k}})(E_{\vec{k}+\vec{q}} \mp \xi_{\vec{k}+\vec{q}})}{2E_{\vec{k}+\vec{q}}(i\varpi_m - E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}+\vec{q}})}. \quad (4.62)$$

en de laatste twee termen voor M_{11} en M_{22} :

$$\frac{(i\varpi_m + E_{\vec{k}} \mp \xi_{\vec{q}+\vec{k}})(E_{\vec{k}} \pm \xi_{\vec{k}})}{(i\varpi_m + E_{\vec{k}} + E_{\vec{q}+\vec{k}})(i\varpi_m + E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}+\vec{q}})} = \frac{(E_{\vec{k}} \pm \xi_{\vec{k}})(E_{\vec{k}+\vec{q}} \pm \xi_{\vec{k}+\vec{q}})}{2E_{\vec{k}+\vec{q}}(i\varpi_m + E_{\vec{k}} + E_{\vec{q}+\vec{k}})} + \frac{(E_{\vec{k}} \pm \xi_{\vec{k}})(E_{\vec{k}+\vec{q}} \mp \xi_{\vec{k}+\vec{q}})}{2E_{\vec{k}+\vec{q}}(i\varpi_m + E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}+\vec{q}})}. \quad (4.63)$$

Gebruikmakend van deze laatste vier uitkomsten en vgl. (4.57), kan dit terug volledig worden uitgeschreven. Hierbij zal in één keer de substitutie $\vec{k} \rightarrow \vec{k} - \vec{q}/2$ worden doorgevoerd en om de notatie zo eenvoudig mogelijk te houden, zullen de volgende substituties worden doorgevoerd:

$$\begin{aligned} X_{\pm} &= \frac{\sinh(\beta E_{\vec{k} \pm \vec{q}/2})}{\cosh(\beta E_{\vec{k} \pm \vec{q}/2}) + \cosh(\beta \zeta)} \quad \text{en} \quad X = \frac{\sinh(\beta E_{\vec{k}})}{\cosh(\beta E_{\vec{k}}) + \cosh(\beta \zeta)} \\ E_{\pm} &= E_{\vec{k} \pm \vec{q}/2} \quad \text{en} \quad E = E_{\vec{k}} \\ \xi_{\pm} &= \xi_{\vec{k} \pm \vec{q}/2} \quad \text{en} \quad \xi = \xi_{\vec{k}} \\ \Gamma_{\pm} &= \Gamma\left(\vec{k} \pm \frac{\vec{q}}{2}\right) \quad \text{en} \quad \Gamma = \Gamma(\vec{k}). \end{aligned} \quad (4.64)$$

Hierbovenop zullen ook de producten in de tellers van vgl. (4.62) en (4.63) worden uitgewerkt. Met dit alles kan vgl. (4.57) herschreven worden tot:

$$\begin{aligned}
M_{12} &= \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{2E_-} X_- \Gamma_- \Gamma_+ [\Gamma^*]^2 \Delta^2 \left(\frac{-1}{2E_+(i\varpi_m + E_+ - E_-)} \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2E_+(i\varpi_m - E_+ - E_-)} + \frac{-1}{2E_+(i\varpi_m + E_- + E_+)} + \frac{1}{2E_+(i\varpi_m + E_- - E_+)} \right) \\
M_{22} &= -\frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{2E_-} X_- |\Gamma|^2 \left(\frac{-E_- E_+ + E_- \xi_+ - \xi_- E_+ + \xi_- \xi_+}{2E_+(i\varpi_m - E_- + E_+)} \right. \\
&\quad + \frac{-E_- E_+ - E_- \xi_+ - \xi_- E_+ - \xi_- \xi_+}{2E_+(i\varpi_m - E_- - E_+)} + \frac{E_- E_+ - E_- \xi_+ - \xi_- E_+ + \xi_- \xi_+}{2E_+(i\varpi_m + E_- + E_+)} \\
&\quad \left. + \frac{E_- E_+ + E_- \xi_+ - \xi_- E_+ - \xi_+ \xi_-}{2E_+(i\varpi_m + E_- - E_+)} \right) \\
M_{11} &= -\frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{2E_-} X_- |\Gamma|^2 \left(\frac{-E_- E_+ - E_- \xi_+ + \xi_- E_+ + \xi_- \xi_+}{2E_+(i\varpi_m - E_- + E_+)} \right. \\
&\quad + \frac{-E_- E_+ + E_- \xi_+ + \xi_- E_+ - \xi_- \xi_+}{2E_+(i\varpi_m - E_- - E_+)} + \frac{E_- E_+ + E_- \xi_+ + \xi_- E_+ + \xi_- \xi_+}{2E_+(i\varpi_m + E_- + E_+)} \\
&\quad \left. + \frac{E_- E_+ - E_- \xi_+ + \xi_- E_+ - \xi_+ \xi_-}{2E_+(i\varpi_m + E_- - E_+)} \right) \\
M_{21} &= \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{2E_-} X_- \Gamma_-^* \Gamma_+^* [\Gamma]^2 (\Delta^*)^2 \left(\frac{-1}{2E_+(i\varpi_m + E_+ - E_-)} \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2E_+(i\varpi_m - E_+ - E_-)} + \frac{-1}{2E_+(i\varpi_m + E_- + E_+)} + \frac{1}{2E_+(i\varpi_m + E_- - E_+)} \right). \tag{4.65}
\end{aligned}$$

4.5 Uitdrukkingen symmetrisch maken

Als laatste stap om dit te herschrijven zal de sommatie index een laatste keer worden herschreven $\vec{k} \rightarrow -\vec{k}$. Het effect hiervan is relatief eenvoudig:

$$\xi_{\pm} \rightarrow \xi_{\mp} \quad \text{en} \quad \xi \rightarrow \xi, \tag{4.66}$$

$$\Gamma_{\pm} \rightarrow -\Gamma_{\mp} \quad \text{en} \quad \Gamma \rightarrow -\Gamma, \tag{4.67}$$

$$E_{\pm} \rightarrow E_{\mp} \quad \text{en} \quad E \rightarrow E, \tag{4.68}$$

$$X_{\pm} \rightarrow X_{\mp}. \tag{4.69}$$

Aangezien de nieuwe uitdrukking simpelweg deze substitutie doorvoeren is, zal dit hier niet worden herhaald. De volgende stap is deze nieuwe uitdrukking bij de vorige (vgl. (4.65)) op

te tellen en het geheel te delen door 2. Dit resulteert in:

$$\begin{aligned}
M_{12} &= \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{\Gamma_- \Gamma_+ [\Gamma^*]^2 \Delta^2}{8E_+ E_-} \left[(X_- + X_+) \left(\frac{1}{i\varpi_m - E_+ - E_-} + \frac{-1}{i\varpi_m + E_- + E_+} \right) \right. \\
&\quad \left. + (X_- - X_+) \left(\frac{-1}{i\varpi_m + E_+ - E_-} + \frac{1}{i\varpi_m + E_- - E_+} \right) \right] \\
M_{22} &= -\frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{|\Gamma|^2}{8E_+ E_-} \left[\right. \\
&\quad \times (X_- + X_+) \left(\frac{-E_- E_+ - E_- \xi_+ - \xi_- E_+ - \xi_- \xi_+}{i\varpi_m - E_- - E_+} + \frac{E_- E_+ - E_- \xi_+ - \xi_- E_+ + \xi_- \xi_+}{i\varpi_m + E_- + E_+} \right) \\
&\quad \left. + (X_- - X_+) \left(\frac{-E_- E_+ + E_- \xi_+ - \xi_- E_+ + \xi_- \xi_+}{i\varpi_m - E_- + E_+} + \frac{E_- E_+ + E_- \xi_+ - \xi_- E_+ - \xi_- \xi_+}{i\varpi_m + E_- - E_+} \right) \right] \\
M_{11} &= -\frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{|\Gamma|^2}{8E_+ E_-} \left[\right. \\
&\quad (X_- + X_+) \left(\frac{-E_- E_+ + E_- \xi_+ + \xi_- E_+ - \xi_- \xi_+}{i\varpi_m - E_- - E_+} + \frac{E_- E_+ + E_- \xi_+ + \xi_- E_+ + \xi_- \xi_+}{i\varpi_m + E_- + E_+} \right) \\
&\quad \left. (X_- - X_+) \left(\frac{-E_- E_+ - E_- \xi_+ + \xi_- E_+ + \xi_- \xi_+}{i\varpi_m - E_- + E_+} + \frac{E_- E_+ - E_- \xi_+ + \xi_- E_+ - \xi_- \xi_+}{i\varpi_m + E_- - E_+} \right) \right] \\
M_{21} &= \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{\Gamma_-^* \Gamma_+^* [\Gamma]^2 (\Delta^*)^2}{8E_+ E_-} \left[(X_- + X_+) \left(\frac{1}{i\varpi_m - E_+ - E_-} + \frac{-1}{i\varpi_m + E_- + E_+} \right) \right. \\
&\quad \left. + (X_- - X_+) \left(\frac{-1}{i\varpi_m + E_+ - E_-} + \frac{1}{i\varpi_m + E_- - E_+} \right) \right]. \tag{4.70}
\end{aligned}$$

4.6 Actie in de amplitude en fase basis

De laatste stap in deze lange afleiding is de matrix herschrijven naar de velden $a_{\vec{q},m}$ en $\theta_{\vec{q},m}$. Dit kan worden gedaan door rechtstreeks vgl. (4.25) en (4.26) in te vullen in vgl. (4.56):

$$\begin{aligned}
\sum_{\vec{k},n} \text{Tr}_\sigma \left\langle \vec{k}, n \mid \mathbb{G}_{sp} \mathbb{F} \mathbb{G}_{sp} \mathbb{F} \mid \vec{k}, n \right\rangle &= \sum_{\vec{q},m} \left[M_{12}(a_{\vec{q},m} - i\Delta\theta_{\vec{q},m})(a_{-\vec{q},-m} - i\Delta\theta_{-\vec{q},-m}) \right. \\
&\quad + M_{22}(a_{\vec{q},m} + i\Delta\theta_{\vec{q},m})(a_{-\vec{q},-m} - i\Delta\theta_{-\vec{q},-m}) + M_{11}(a_{\vec{q},m} - i\Delta\theta_{\vec{q},m})(a_{-\vec{q},-m} + i\Delta\theta_{-\vec{q},-m}) \\
&\quad \left. + M_{21}(a_{\vec{q},m} + i\Delta\theta_{\vec{q},m})(a_{-\vec{q},-m} + i\Delta\theta_{-\vec{q},-m}) \right]. \tag{4.71}
\end{aligned}$$

Wat dus neerkomt op

$$\sum_{\vec{q},n} \begin{pmatrix} \Delta\theta_{-\vec{q},-n} & a_{-\vec{q},-n} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} M_{++}(i\omega_n, \vec{q}) & -iM_{+-}(i\omega_n, \vec{q}) \\ iM_{-+}(i\omega_n, \vec{q}) & M_{--}(i\omega_n, \vec{q}) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \Delta\theta_{\vec{q},n} \\ a_{\vec{q},n} \end{pmatrix}, \tag{4.72}$$

met

$$\begin{aligned}
M_{++} &= -M_{12} + M_{22} + M_{11} - M_{21}, \\
M_{--} &= M_{12} + M_{22} + M_{11} + M_{21}, \\
M_{+-} &= M_{12} + M_{22} - M_{11} - M_{21}, \\
M_{-+} &= -M_{12} + M_{22} - M_{11} + M_{21}.
\end{aligned} \tag{4.73}$$

Hierin kan vgl. (4.70) worden ingevuld om het uiteindelijke resultaat te bekomen:

$$\begin{aligned}
M_{\pm\pm} &= \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{8E_+E_-} \left\{ (X_- + X_+) \left[2|\Gamma|^2(E_-E_+ + \xi_- \xi_+) \mp \Gamma_- \Gamma_+ [\Gamma^*]^2 \Delta^2 \mp \Gamma_-^* \Gamma_+^* [\Gamma]^2 (\Delta^*)^2 \right] \right. \\
&\quad \times \left(\frac{1}{i\varpi_m - E_+ - E_-} - \frac{1}{i\varpi_m + E_- + E_+} \right) \\
&\quad + (X_- - X_+) \left[2|\Gamma|^2(E_-E_+ - \xi_- \xi_+) \mp \Gamma_- \Gamma_+ [\Gamma^*]^2 \Delta^2 \mp \Gamma_-^* \Gamma_+^* [\Gamma]^2 (\Delta^*)^2 \right] \\
&\quad \times \left. \left(\frac{1}{i\varpi_m + E_+ - E_-} - \frac{1}{i\varpi_m + E_- - E_+} \right) \right\}, \\
M_{\pm\mp} &= \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{8E_+E_-} \left\{ (X_- + X_+) \left[2|\Gamma|^2(E_- \xi_+ + E_+ \xi_-) \left(\frac{1}{i\varpi_m - E_+ - E_-} + \frac{1}{i\varpi_m + E_- + E_+} \right) \right. \right. \\
&\quad \pm (\Gamma_- \Gamma_+ [\Gamma^*]^2 \Delta^2 - \Gamma_-^* \Gamma_+^* [\Gamma]^2 (\Delta^*)^2) \left(\frac{1}{i\varpi_m - E_+ - E_-} - \frac{1}{i\varpi_m + E_- + E_+} \right) \left. \right] \\
&\quad + (X_- - X_+) \left[2|\Gamma|^2(\xi_- E_+ - \xi_+ E_-) \left(\frac{1}{i\varpi_m + E_+ - E_-} + \frac{1}{i\varpi_m + E_- - E_+} \right) \right. \\
&\quad \pm (\Gamma_- \Gamma_+ [\Gamma^*]^2 \Delta^2 - \Gamma_-^* \Gamma_+^* [\Gamma]^2 (\Delta^*)^2) \left(\frac{1}{i\varpi_m + E_+ - E_-} - \frac{1}{i\varpi_m + E_- - E_+} \right) \left. \right] \left. \right\}
\end{aligned}$$

4.7 1/g-deel

Nu de trace uit vgl. (4.29) gekend is, moet alleen nog de eerste term worden bepaald door vgl. (4.25) en (4.26) in de vergelijking in te vullen:

$$\begin{aligned}
\sum_{\vec{q},m} \frac{\bar{\phi}_{\vec{q},m} \phi_{\vec{q},m}}{g} &= \sum_{\vec{q},m} \frac{1}{g} (a_{-\vec{q},-m} - i\Delta \theta_{-\vec{q},-m}) (a_{\vec{q},m} + i\Delta \theta_{\vec{q},m}) \\
&= \sum_{\vec{q},m} \frac{1}{g} (a_{-\vec{q},-m} a_{\vec{q},m} + i\Delta a_{-\vec{q},-m} \theta_{\vec{q},m} - i\Delta \theta_{-\vec{q},-m} a_{\vec{q},m} + \Delta^2 \theta_{-\vec{q},-m} \theta_{\vec{q},m}). \tag{4.74}
\end{aligned}$$

Deze uitdrukking kan eenvoudiger worden geschreven door een equivalente uitdrukking te berekenen:

$$\frac{1}{2} \sum_{\vec{q},m} \left[\frac{\bar{\phi}_{\vec{q},m} \phi_{\vec{q},m}}{g} + \frac{\bar{\phi}_{-\vec{q},-m} \phi_{-\vec{q},-m}}{g} \right] = \sum_{\vec{q},m} \frac{1}{g} (a_{-\vec{q},-m} a_{\vec{q},m} + \Delta^2 \theta_{-\vec{q},-m} \theta_{\vec{q},m}) \tag{4.75}$$

wat dus kan worden geschreven als

$$\sum_{\vec{q},m} \frac{\bar{\phi}_{\vec{q},m} \phi_{\vec{q},m}}{g} = \sum_{\vec{q},n} \frac{1}{g} \begin{pmatrix} \Delta\theta_{-\vec{q},-n} & a_{-\vec{q},-n} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \Delta\theta_{\vec{q},n} \\ a_{\vec{q},n} \end{pmatrix}. \quad (4.76)$$

De g kan hier ook nog worden vervangen door gebruik te maken van de gapvergelijking (3.96), wat leidt tot:

$$\sum_{\vec{q},m} \frac{\bar{\phi}_{\vec{q},m} \phi_{\vec{q},m}}{g} = - \sum_{\vec{q},n} \frac{1}{V} \sum_k \frac{1}{2E_k} |\Gamma|^2 X \begin{pmatrix} \Delta\theta_{-\vec{q},-n} & a_{-\vec{q},-n} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \Delta\theta_{\vec{q},n} \\ a_{\vec{q},n} \end{pmatrix}, \quad (4.77)$$

waarbij opnieuw gebruik is gemaakt van de notatie uit de vorige sectie (vgl. (4.64)).

4.8 De fluctuatie toestandssom

Vgl. (4.72) en (4.77) invullen in vgl. (4.29) levert de finale toestandssom:

$$\mathcal{Z}_q = \mathcal{Z}_{sp} \mathcal{Z}_{fl} = \int \mathcal{D}a_{\vec{q},m} \mathcal{D}\theta_{\vec{q},m} \exp \{-S_{fl}\}, \quad (4.78)$$

waarbij S_{fl} de actie is van het fluctuatiedeel en is kan geschreven worden als:

$$S_{fl} = \sum_{\vec{q},n} \begin{pmatrix} \Delta\theta_{-\vec{q},-n} & a_{-\vec{q},-n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2}M_{++}(i\omega_n, \vec{q}) + M_{00} & -\frac{i}{2}M_{+-}(i\omega_n, \vec{q}) \\ \frac{i}{2}M_{-+}(i\omega_n, \vec{q}) & \frac{1}{2}M_{--}(i\omega_n, \vec{q}) + M_{00} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta\theta_{\vec{q},n} \\ a_{\vec{q},n} \end{pmatrix} \quad (4.79)$$

waarbij de definities van de $M_{\pm\pm}$ zijn gegeven in vgl. (4.70) en

$$M_{00} = \frac{1}{V} \sum_k \frac{|\Gamma|}{2E} X. \quad (4.80)$$

De matrix in vgl. (4.79) kan worden geschreven als $M_{\vec{q},n}$ en komt overeen met de fluctuatiematrix. Deze matrix kan nu worden gebruikt om de responsfuncties te berekenen, wat het onderwerp zal zijn van het volgende hoofdstuk. Hierbij zal de discussie worden beperkt tot $T = 0$ en $\zeta = 0$, wat maakt dat de fluctuatiematrix zal vereenvoudigen aangezien de $X_{\pm}$ die gedefinieerd is in vgl. (4.64) zich dan vereenvoudigd tot:

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \left[X_{\pm} \Big|_{\zeta=0} \right] = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \left[\tanh \left(\beta E_{\vec{k} \pm \vec{q}/2} \right) \right] = 1. \quad (4.81)$$

Hoofdstuk 5

Responsfuncties

In het vorige hoofdstuk is de fluctuatiematrix (vgl. (4.79)) bepaald, waaruit nu de responsfuncties zullen worden berekend. In sectie 5.1 zal een uiteenzetting worden geven hoe, startend van de fluctuatiematrix, kan worden overgegaan naar de responsfuncties. In sectie 5.2 zullen dan de responsfuncties worden berekend, besproken en vergeleken met een recent theoretisch werk.

5.1 Van Greense functies naar responsfunctie

De Matsubara Greense functie komt overeen met de paarexcitatie waarden van de kwantumveldentheorie, voor een algemene toestandssom kan dit met vgl. (2.15) als [55]:

$$\begin{aligned}\mathbb{G}(\vec{q}, n; \vec{q}', n') &= -\langle \bar{\phi}_{\vec{q}', n'} \phi_{\vec{q}, n} \rangle \\ &= \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\bar{\phi} \int \mathcal{D}\phi (-\bar{\phi}_{\vec{q}, n} \phi_{\vec{q}', n'}) \exp \left\{ - \sum_{\vec{q}, n} \bar{\phi}_{\vec{q}, n} (-\mathbb{G}_{\vec{q}, n; \vec{q}', n'}^{-1}) \phi_{\vec{q}', n'} \right\} = [\mathbb{G}_{\vec{q}, n; \vec{q}', n'}^{-1}]^{-1}. \quad (5.1)\end{aligned}$$

Deze grootheid kan eenvoudig worden berekend voor de actie die overeenkomt in de fluctuatiematrix in vgl. (4.79) en zal kunnen worden geïnterpreteerd als de Greense functie van de fluctuaties. Deze matrix is diagonaal in $\vec{q}$ en n . Dit maakt dat de Greense functie eveneens diagonaal zal zijn, en dat het inverse van de M-matrix ($M_{\vec{q}, n}$) moet worden uitgerekend om de Greense functie te bekomen:

$$\begin{aligned}\mathbb{G}(\vec{q}, n; \vec{q}, n) &= \frac{1}{\det M} \begin{pmatrix} \frac{1}{2}M_{--}(i\omega_n, \vec{q}) + M_{00} & -\frac{i}{2}M_{-+}(i\omega_n, \vec{q}) \\ \frac{i}{2}M_{+-}(i\omega_n, \vec{q}) & \frac{1}{2}M_{++}(i\omega_n, \vec{q}) + M_{00} \end{pmatrix} \\ &= - \begin{pmatrix} \langle \theta_{-\vec{q}, -m} \theta_{\vec{q}, m} \rangle & \langle \theta_{-\vec{q}, -m} a_{\vec{q}, m} \rangle \\ \langle a_{-\vec{q}, -m} \theta_{\vec{q}, m} \rangle & \langle a_{-\vec{q}, -m} a_{\vec{q}, m} \rangle \end{pmatrix}. \quad (5.2)\end{aligned}$$

De Greense functies die hier zullen worden besproken zijn de diagonaalelementen. Het (11)-element komt overeen met de Greense functie voor de fase, en het (22)-element komt overeen met de fase-fase Greense functie. De analytische voortzetting van deze Greense functie kan dan worden gemaakt, dit is ook weergegeven in figuur 5.1. Deze analytische voortzetting is echter niet triviaal [33], aangezien $i\omega_n$ vervangen door een complexe variabele z leidt tot een branch-cut op de reële as. Echter, om de responsfuncties te berekenen is het berekenen

van de geretardeerde Greense functie voldoende, door de substitutie $i\omega_n \rightarrow \omega + i\delta$ door te voeren [41]:

$$\mathbb{G}^R(\omega) = \mathbb{G}(\omega + i\delta). \quad (5.3)$$

Deze functie kan gebruikt worden om allerlei fysische grootheden af te leiden waaronder ook de responsfunctie. Deze functie kan worden berekend door het imaginaire deel van de geretardeerde Greense functie te nemen [31, 41]:

$$\chi = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[\mathbb{G}^R(\omega)] = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[\mathbb{G}(\omega + i\delta)]. \quad (5.4)$$

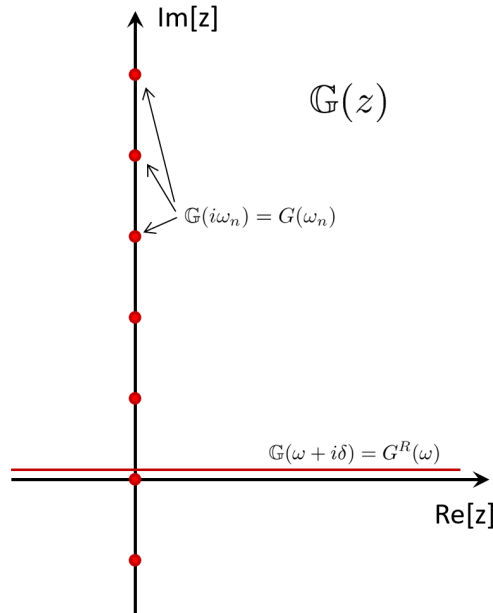
De respons toont hoe het systeem reageert op een externe aandrijving en zal dus zeer sterk toenemen als de aandrijvingsfrequentie overeenkomt met één van de eigenfrequenties van de collectieve modes, waardoor deze ook kunnen worden bepaald. Een uitgebreidere discussie van deze grootheid is reeds gegeven in sectie 1.3. In dit systeem komt de responsfunctie voor de fase-fase mode overeen met:

$$\chi_{\theta\theta} = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[\mathbb{G}_{11}(\omega + i\delta)] \quad (5.5)$$

en de amplitude-amplitude met

$$\chi_{aa} = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[\mathbb{G}_{22}(\omega + i\delta)]. \quad (5.6)$$

De resultaten van deze responsfuncties zullen nu worden besproken in de rest van dit hoofdstuk.



Figuur 5.1: Analytische voortzetting van de Matsubara Greense functie ($\mathbb{G}$) naar de geretardeerde Greense functie ($\mathbb{G}^R$) [56].

5.2 Responsfuncties

In deze secties zullen kwalitatief de responsfuncties voor verschillende Δ 's en dus verschillende $(k_f^3 a)^{-1}$ worden besproken voor $T = 0$ en $\zeta = 0$. Enkel de $m = 0$ interactie zal worden besproken, aangezien de $m = \pm 1$ interacties tot kwalitatief zeer gelijkaardige resultaten leidt, met het enige drastische verschil dat het gedrag in het xy -vlak voor het $m = 0$ kanaal zal overeenkomen met het gedrag in de z -richting voor $m = \pm 1$ en dat de z -richting van het $m = 0$ kanaal overeen zal komen met het xy -vlak voor $m = \pm 1$. Het gedrag van de responsfuncties is zeer complex en kan niet tot in detail worden begrepen. De uitdrukkingen achterhalen die met iedere energieband overeenkomen, vereist een studie op zich en valt buiten het doel van deze thesis. Voor s -golf superfluida bestaan er wel uitdrukkingen voor deze banden, maar de vorm van deze banden hebben ook geen duidelijke fysische interpretatie.

De reden voor dit complexe gedrag berust op de moeilijke Greense functie en bijgevolg ook de moeilijke Bogoliubov energie, die voor p -golf superfluida nog complexer zijn dan voor s -golf. Zoals in sectie 3.7.1 werd aangehaald, komen de polen van de Greense functie overeen met de energieën van de verschillende quasideeltjes die het systeem beschrijven. De Greense functie waarbij fluctuaties mee in rekening zijn gebracht (vgl. (4.79)), heeft echter veel complexere polen, die allemaal de volgende vorm hebben (waarbij $\pm$ is geschreven om duidelijk te maken dat deze onafhankelijk is van de andere $\pm$):

$$\pm(E_{\vec{k}+\frac{\vec{q}}{2}} \pm E_{\vec{k}-\frac{\vec{q}}{2}}). \quad (5.7)$$

Het minima van deze pool zal dan overeenkomen met de start van energieband en dus:

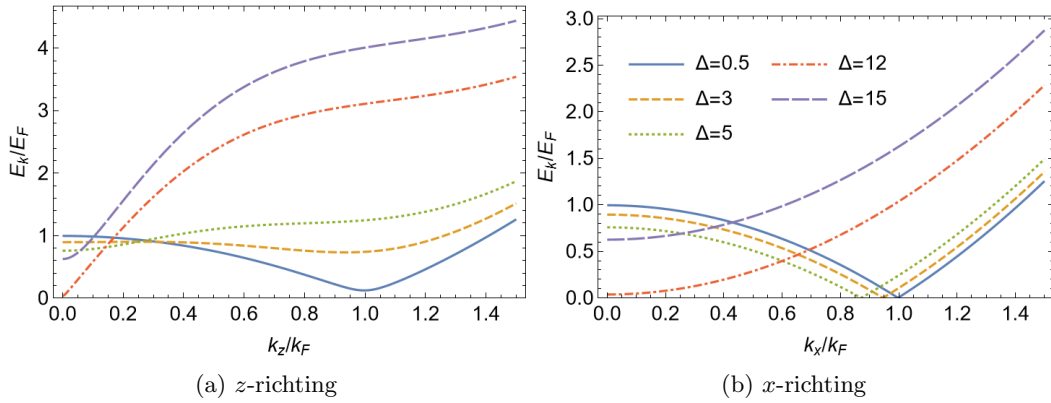
$$\omega_{\vec{q}} = \min_{\vec{k}} \left| (E_{\vec{k}+\frac{\vec{q}}{2}} \pm E_{\vec{k}-\frac{\vec{q}}{2}}) \right|. \quad (5.8)$$

Deze uitdrukkingen zullen echter alle mogelijke energiebanden geven en zullen geen informatie geven over de verbreding, hoe sterk ze aanwezig zijn, of de continua die zich in de respons bevinden. Ze maken wel duidelijk dat de respons niet triviaal is. Daarom zal het gedrag direct worden beschreven met de responsfuncties. Wat wel duidelijk wordt uit vgl. (5.8), is het startpunt van de energiebanden bij $\vec{q} = 0$. De $\pm$ in vgl. (5.8) leidt tot twee mogelijkheden:

$$\omega_0 = \min_{\vec{k}} \left| 2\sqrt{(k^2 - \mu)^2 + |\Gamma(\vec{k})\Delta|^2} \right| \quad \text{en} \quad \tilde{\omega}_0 = 0, \quad (5.9)$$

waarbij de eerste uitdrukking overeen zal komen met de paarbrekingsmode en de tweede met de geluidsgolf. Aangezien $\Gamma(\vec{k}) = 0$ kan worden gekozen door $\vec{k}$ in het xy -vlak te oriënteren, verandert de positie en aanwezigheid van een bandkloof¹ drastisch. De Bogoliubov energie is weergegeven in figuur 5.2 voor een aantal verschillende Δ in de x en z richting. In diep BEC, waar μ negatief is komt het minima overeen met $\vec{k} = 0$ en zal de energieband dus starten op 2μ . Als daarentegen μ positief wordt, zal de bandkloof nul worden door $k^2 = \mu$ te stellen, dit was ook opgemerkt door [26]. Bij het berekenen van de responsfuncties zal echter wel blijken dat er energiebanden lijken te zijn die bij hogere energieën starten en enorm verbreed zijn. Dit wordt veroorzaakt omdat er nog steeds een bandkloof aanwezig is in de andere richtingen, waarbij de bandkloof afhankelijk is van de richting (en dus de θ -coördinaat uit bolcoördinaten). De bandkloof neemt zeer snel toe indien wordt afgeweken van het xy -vlak,

¹De bandkloof komt overeen met de minimale energie die nodig is om een excitatie te veroorzaken voor een bepaalde band.



Figuur 5.2: De Bogoliubov energie in de x en z richting voor verschillende waarden van Δ (de legende geldt voor beide figuren). Deze plot is gemaakt bij $T = 0$, $\zeta = 0$, $m = 0$.

waarna deze convergeert. Bijgevolg zijn er veel richtingen met een gelijkaardige bandkloof en is er dus schijnbaar een energieband aanwezig.

Deze beschrijving van het gedrag zal duidelijker worden met een aantal voorbeelden van de responsfunctie in zowel het BEC als het BCS regime. De eerste twee voorbeelden zullen overeenkomen het diep BCS regime. Hierna zal een voorbeeld worden gegeven van het diep BEC regime en uiteindelijk zal er ook een voorbeeld worden gegeven van de crossover.

5.2.1 Diep BCS

In figuur 5.3 zijn de responsfuncties gegeven voor $\Delta = 0.5$, wat overeenkomt met $(k_F^3 a)^{-1} = -0.12$. Bij de twee faseresponsfuncties lijkt er een band aanwezig te zijn met een bandkloof. Deze band bevindt zich niet op een triviale plaats zoals bij s -golf interacties. De band start ook niet op de gemiddelde bandkloof of op de bandkloof in de z -richting. De band lijkt in plaats daarvan te starten op ± 1.75 keer het minima van de Bogoliubov energie in de z -richting. De reden hiervoor is duidelijk uit figuur 5.3e, waar $2E_k$ is geplot in functie van k voor verschillende hoeken (θ uit bolcoördinaten). Zoals eerder aangehaald in deze sectie, is er geen bandkloof aanwezig in het xy -vlak ($\theta = \pi/2$) op $k^2 = \mu$. Uit de figuur² is het ook duidelijk dat als de hoek groter of kleiner wordt gemaakt, de bandkloof groter wordt. Hierbij is het opvallend dat kleine afwijkingen van het xy -vlak, de bandkloof zeer snel doet toenemen en voor grotere afwijkingen, de bandkloof traag lijkt te convergeren. Dit is ook duidelijk uit de kleine figuur in figuur 5.3f. Hierdoor zullen bandkloven dicht bij de maximale bandkloof veel meer voorkomen voor willekeurige θ , wat weergegeven is met een histogram in figuur 5.3f.

Deze distributie aan bandkloven weerspiegelt zich ook in responsfuncties van de fase, waarop de paarbrekingsmode duidelijk zichtbaar is. Deze responsfuncties zijn gegeven in figuren 5.6a en 5.6c. De paarbrekingsmode komt voor s -golf interacties ook overeen met de faserespons [33]. Lage ω komen overeen met lage energieën en dus lage bandkloven. Er zijn maar een kleine hoeveelheid aan deze kleine bandkloven dus de respons is laag. Als ω toeneemt zal

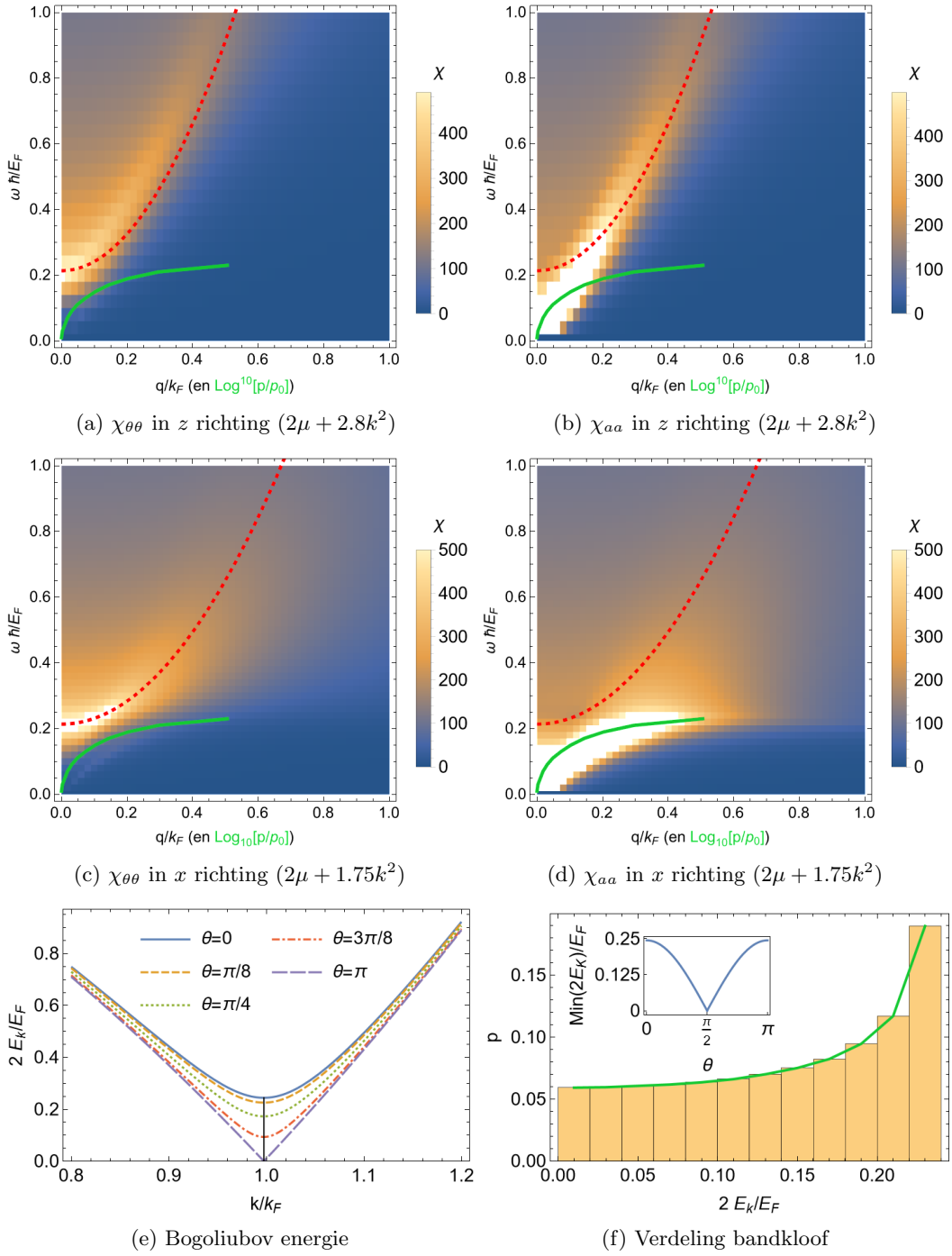
²Merk hierbij op dat enkel in het diep BCS regime, de k die overeenkomt met dit minima ongeveer gelijk is, dieper in de crossover is dit niet langer het geval.

de hoeveelheid toestanden met de overeenkomstige bandkloven ook toenemen, waardoor de respons toeneemt tot de maximale bandkloof is bereikt. De respons is echter niet maximaal bij de ω die overeenkomt met de maximale bandkloof, maar iets eronder omdat de omliggende bandkloven van belang zijn.

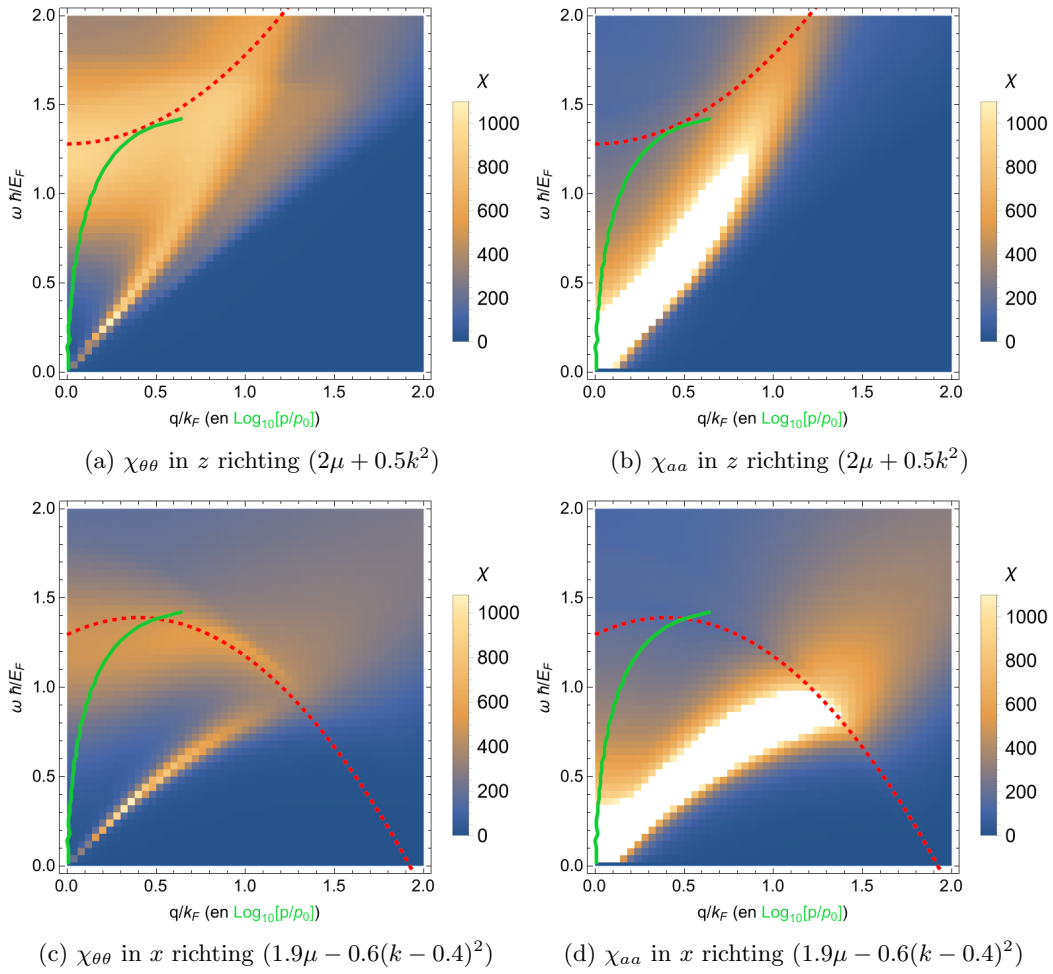
Naast deze sterke respons waar ω plots de bandkloof kan overbruggen, is er ook een continuüm aanwezig. Dit wordt veroorzaakt door paren die naast het breken ook nog extra kinetische energie verkrijgen. In de z -richting bevindt dit continuüm zich boven de paarbrekingsmode. In de x -richting bereidt dit continuüm zich uit naar groter waarden van q .

De geluidsgolf is, net zoals bij s -golf interacties, zichtbaar in de responsfunctie van de amplitude, deze is geplot in figuren 5.3b en 5.3d. De belangrijkste component van deze band is convex, maar er lijkt ook een kleine bijdrage concaaf te zijn. Voor s -golf interacties zijn er twee regimes, voor diep BCS zijn de banden concaaf, voor minder diep in het BCS regime zijn de banden voor kleine q convex en worden deze concaaf voor hogere q [32]. In p -golf lijkt de band een mengeling van de twee te zijn, maar dominant concaaf. Het valt ook op dat net zoals bij de paarbrekingsmode de geluidsband in de x -richting minder steil is.

In figuur 5.4 zijn de responsfuncties gegeven voor $\Delta = 3$ of $(k_F^3 a)^{-1} = -0.03$. De positie van de paarbrekingsmode kan op dezelfde manier worden verklaard en de banden starten nog steeds op ± 1.75 keer het minima van de Bogoliubov energie in de z -richting. Aangezien deze Δ zich dieper in de crossover bevindt, is er een opmenging van de fase en amplitude modes, dit komt ook voor bij s -golf interacties [33]. Het is ook opvallend dat in de x -richting zowel de geluidsgolf, als de paarbrekingsmode concaaf zijn geworden.



Figuur 5.3: Responsfuncties in diep BCS, voor $\Delta = 0.5$, voor het $m = 0$ kanaal bij $T = 0$ en $\zeta = 0$. De rodestreepjes lijn in a tot d, komt overeen met met het voorschrift tussen haakjes bij iedere figuur. De groene lijn in plots a tot d komen overeen met $\log_{10}(p/p_0)$ (x -as) in functie van ω (de y -as), waarbij p overeenkomt met de waarschijnlijkheid in figuur f, en p_0 met de waarde van p in het eerste blokje van het histogram. Figuur f, is een histogram dat gecreëerd is door van alle hoeken ($\theta \in [0, \pi]$) het minima van de Bogoliubov energie te bepalen, en van deze minima een histogram te maken (hierbij is gekozen voor bins met een breedte van $0.2E_F$ omdat dit overeenkomt met de resolutie van de responsfuncties).



Figuur 5.4: Responsfuncties in BCS, voor $\Delta = 3$, voor het $m = 0$ kanaal bij $T = 0$ en $\zeta = 0$. De rode streepjeslijn in figuur a tot d, komt overeen met de functievoorschriften bij de figuren. De groene lijn in de plots is op dezelfde manier bepaald zoals in Figuur 5.3.

5.2.2 Diep BEC

In figuur 5.5 zijn de responsfuncties gegeven voor $\Delta = 15$ of $(k_F^3 a)^{-1} = 0.05$. Deze waarde voor Δ komt overeen met een negatieve μ , wat maakt dat er een bandkloof bestaat die start op 2μ . Uit figuur 3.3 is het duidelijk dat deze figuren zich langs de BEC kant bevinden. De paarbrekingsmode in de z -richting lijkt zeer goed overeen te komen met de uitdrukking:

$$E(\vec{q}) \sim \mu + E_B(\vec{k}_z = \vec{q}) \quad (5.10)$$

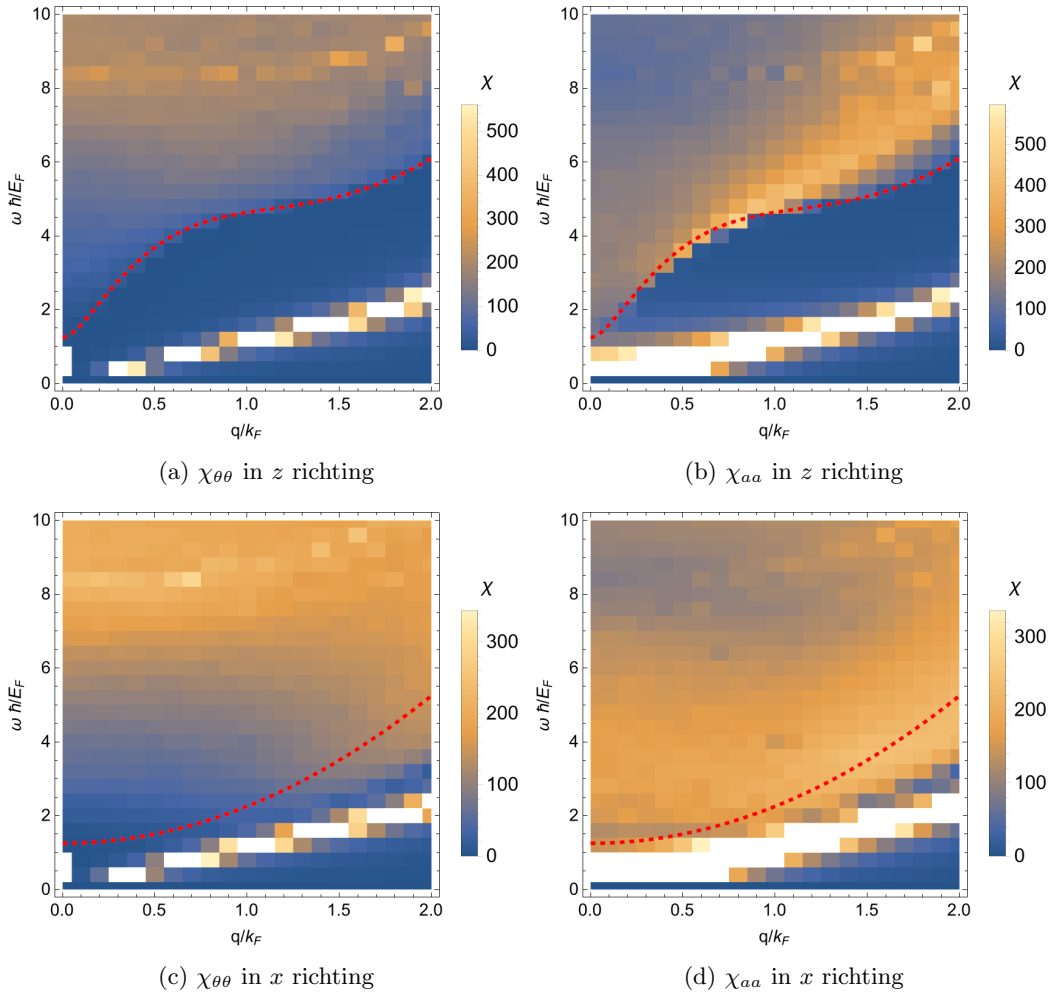
Het is duidelijk dat het continuüm optreedt bij zowel de fase als de amplitude responsfunctie startend van de paarbrekingsmode, maar er is een onderscheid zichtbaar in de interne structuur tussen de twee. De twee responsfuncties lijken samen een meer continue verdeling te maken.

In de x -richtingen heeft de mode een zeer andere vorm en is de respons kleiner. De band lijkt opnieuw overeen te komen met de Bogoliubov energie maar nu in de x -richting:

$$E(\vec{q}) \sim \mu + E_B(\vec{k}_x = \vec{q}) \quad (5.11)$$

Voor een s -golf superfluida wordt eveneens de Bogoliubov energie terug gevonden voor de paarbrekingsmode [6].

De geluidsgolven in alle figuren zijn allen relatief gelijkaardig en een kleine hoeveelheid convex. Wat overeenkomt met de conclusie in s -golf [32].



Figuur 5.5: Responsfuncties in diep BEC, voor $\Delta = 15$, voor het $m = 0$ kanaal bij $T = 0$ en $\zeta = 0$. De rode streepjeslijn komt overeen met de chemische potentiaal plus Bogoliubov energie in de richting van $\vec{q}$ (dit maakt dus dat de band op $q = 0$ start op 2μ).

5.2.3 BEC-BCS transitie

Nu zowel het diep BEC en BCS regime is besproken, kan de overgang tussen de twee regimes worden besproken. De responsfuncties van $\Delta = 5$ of $(k_F^3 a)^{-1} = 0.005$ zijn gegeven in figuur 5.6. Deze Δ is niet willekeurig gekozen tussen de twee regimes, maar is gekozen bij een Δ waarbij het minimum van de Bogoliubov energie in de z -richting overeenkomt met $k_z = 0$, dit is ook grafisch weergegeven in figuur 5.2. Bijgevolg vertoont de z -richting een ander gedrag dan in het BCS regime (zie figuur 5.4). Daarom is er naast een kwadratisch startpunt evolutie ook de Bogoliubov energie geplot in de z -richting zoals besproken in het BEC regime, en de Bogoliubov energie waarvan het startpunt is samengezet met de benaderende start van de resultaten uit het BCS regime. Alle resultaten lijken niet compleet overeen te komen met de band. Dit kan deels verklaard worden door de opmenging van de mode in de fase en amplituderrespons. Door de twee responsen samen te bekijken daalt het algemene maximum van de band en komen de resultaten beter overeen. De band in de x -richting kan nog steeds relatief goed worden gerelateerd aan de BCS beschrijving, als zowel de fase als amplitude mode tegelijk worden bestudeerd. Het is hier opnieuw opvallend dat de geluidsgolf concaaf is in de x -richting. Daarentegen, bij s -golf is dit voor kleine q convex en voor grote q concaaf. De paarbrekingsmode daarentegen lijkt wel convex te zijn geworden. De geluidsgolf en paarbrekingsmode zijn echter wel in elkaar versmolten, waaruit volgt dat het individueel gedrag van deze banden niet langer volledig duidelijk is.

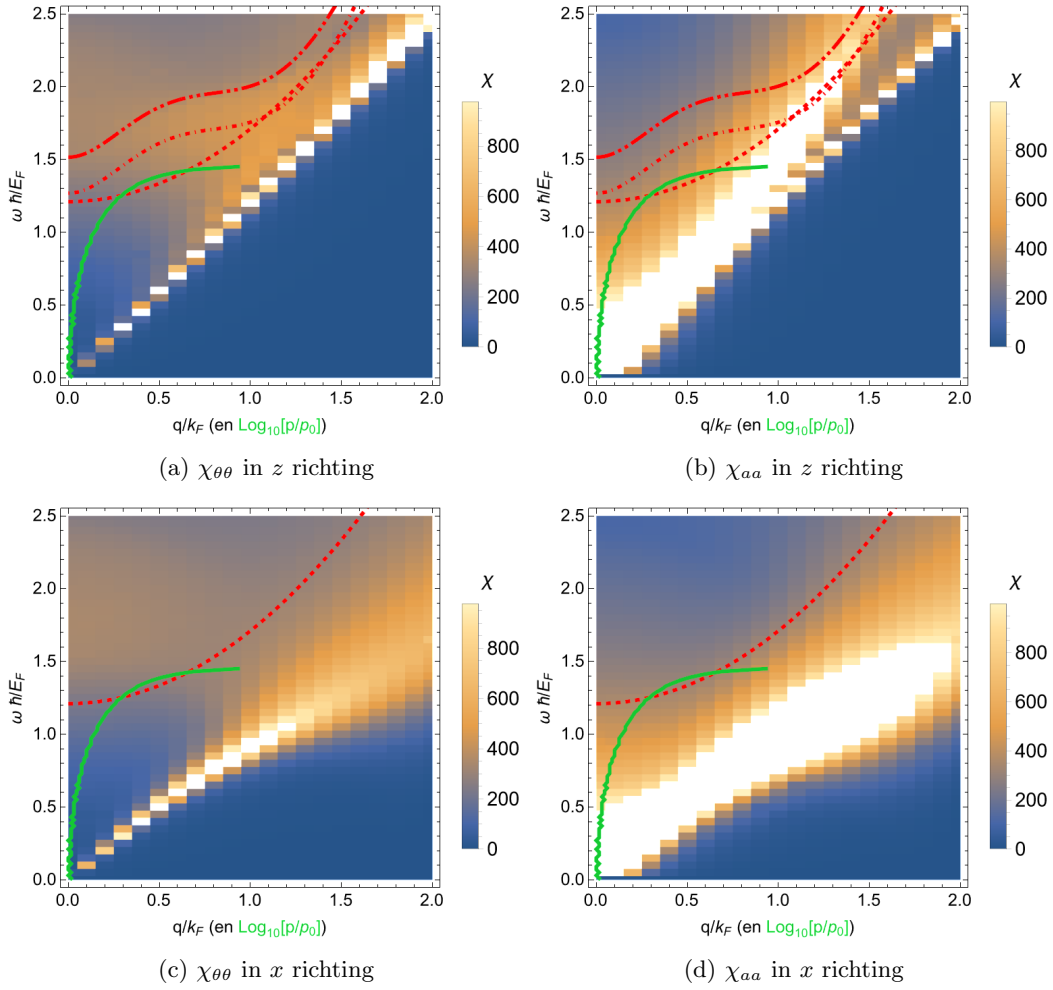
Als Δ verder wordt verhoogd, zal de Bogoliubov frequentie in de z -richting als maar duidelijker tot deze uiteindelijk volledig overeenkomt zoals in figuur 5.5. De x -richting blijft voornamelijk een BCS-achtige band te hebben tot deze uiteindelijk ook dezelfde vorm aanneemt zoals in figuur 5.5. Dit is ook mede veroorzaakt door het feit dat de BEC-Bogoliubov frequentie in de x -richting eveneens kwadratisch is.

5.2.4 Vergelijking met Wang et al.

Wang et al. heeft, tijdens het schrijven van deze thesis, eveneens de responsfuncties berekend voor de paarbrekingsmode [64] bij een BEC en BCS. Deze berekening is gemaakt in het Hamiltoniaans formalisme en gebruikt zeer andere technieken. De respons is ook niet opgedeeld in een fase- en amplitudedeel, wat maakt dat het gehele gedrag in één keer zal worden besproken. Eén van de observaties bij hun berekeningen is dat de respons in de x -richting zwakker is dan in de z -richting. Dit lijkt in deze thesis alleen het geval te zijn in het BEC, in het BCS regime zijn de responsen relatief gelijkaardig. Zowel in het BEC als het BCS regime zijn hun resultaten voor de paarbrekingsmode convex en hebben ze een kwadratische vorm, wat hier ook het geval is. Het exacte startpunt van deze band in het BCS regime is in dit artikel niet in detail besproken en is dus moeilijk te vergelijken. Maar zoals besproken, komen de startpunten van de banden in deze thesis overeen met [27].

5.3 Vooruitblik

Als laatste in dit hoofdstuk, zullen een aantal mogelijkheden worden gegeven om dit onderzoek uit te bereiden. Een volgende stap in dit onderzoek is een bespreking van de responsfuncties op een meer kwantitatieve manier door vgl. (5.8) uit te werken, hierbij zullen in plaats van alleen de minima ook de maxima noodzakelijk zijn. Het effect van temperatuur en spin onbalans op deze responsfuncties kan ook verder worden onderzocht op zowel een



Figuur 5.6: Responsfuncties dicht bij unitariteit, voor $\Delta = 5$, voor het $m = 0$ kanaal bij $T = 0$ en $\zeta = 0$. De rode streepjeslijn in a tot d, komt overeen met $1 \min[E_k(k_z)] + 0.5k^2$ (waarbij nu ook $\min[E_k(k_z)] = \mu$). De streep-punt-puntlijn komt overeen met $\mu + E_k(\vec{k}_z = q)$ en de streep-punt lijn met $E_k(\vec{k}_z = q)$ maar verschoven naar hetzelfde startpunt als de streepjeslijn. De groene lijn in de plots is op dezelfde manier bepaald zoals in Figuur 5.3.

kwalitatieve als een kwantitatieve manier. Ten slotte kunnen de bekomen resultaten worden gebruikt om een experiment te ontwikkelen om deze energiebanden te meten.

Hoofdstuk 6

Conclusie

In deze thesis zijn de collectieve modes van een p-golf fermionisch gas bepaald. De thesis is gestart met het opstellen van de actie en de bijhorende interactiepotentiaal, waaruit dan de vrije energie is berekend. Hieruit is het duidelijk geworden dat een grote waarde voor de ordeparameter overeenkomt met een BEC, en een kleine waarde met een BCS fluïdum. Voor een niet nul temperatuur blijkt dat het aantal paren in het systeem zal dalen tot er geen paarvorming meer optreedt. Dit effect is het grootste aan de BCS zijde van de crossover. Een tweede conclusie die hierbij gemaakt is, is dat een onbalans in de spinpopulaties een eerste orde fase-overgang veroorzaakt. Als de interactiesterkte wordt gewijzigd om over te gaan van een BEC naar een BCS, zal de onbalans een plotse overgang veroorzaken van een gas waar paarvorming optreedt tot een gas waar geen paarvorming voorkomt. Voor een lage onbalans gebeurt dit pas diep in het BCS regime, voor een hoge onbalans kan dit al in het BEC regime voorkomen.

Hiernaast zijn ook de collectieve excitaties berekend voor een gas zonder spin onbalans bij temperatuur nul. Dit is gedaan door quantum fluctuaties in zowel de amplitude als de fase van de ordeparameter in te voeren. Hierbij zijn er twee belangrijke energiemodes zichtbaar. Een geluidsachtige mode en een paarbrekingsmode. Hiernaast is er ook een continuüm zichtbaar dat overeenkomt met het opbreken van paren, waarbij de twee atomen een extra hoeveelheid kinetische energie verkrijgen. In het diep BCS regime, komt de paarbrekingsmode en het geassocieerd continuüm voor in de respons van de fasefluctuaties, en komt de geluidsgolf voor in de respons van de amplitudelfluctuaties. Dichter bij de overgang en in het BEC regime komen deze modes in beide responsfuncties voor.

De geluidsachtige mode is licht convex in het BCS en BEC regime, maar kan concaaf worden in het crossover regime, als het systeem in de richting van het xy -vlak wordt aangedreven.

Het paarbrekings continuüm in het BCS regime heeft geen bandkloof, in dit regime is de chemische potentiaal positief. De sterkste respons is echter niet bij $\omega = 0$. Dit komt omdat de vereiste energie om een paar op te breken nul is in het xy -vlak, maar niet in de andere richting. De energie vereist om een paar op te breken zal initieel snel toenemen als er van het xy -vlak wordt afgeweken, maar zal dan convergeren naar een maximale waarde (die overeenkomt met de z -richting). Dit zorgt voor een ophoping van deze bandkloven bij deze hogere energieën. Hierdoor zullen de grootste responses overeenkomen met deze hogere energieën. Vanuit dit punt zal een kwadratische energiemode ontstaan die overeenkomt

met de paarbrekings mode. Als het systeem in de z -richting wordt aangedreven, bevindt het paarbrekings continuüm zich boven deze mode. Als het systeem daarentegen wordt aangedreven in de x -richting breidt deze zich uit naar grotere waarden van q . Als dieper in de crossover wordt gegaan richting het BEC regime, zal deze mode concaaf worden als het systeem in het xy -vlak wordt aangedreven, en daarna terug convex dieper in het BEC regime. Uiteindelijk als de chemische potentiaal positief wordt in het BEC regime, is er terug een minimale excitatie energie voor het continuüm van 2μ . De mode herleidt zich dan tot de Bogoliubov energie van de richting waarin het systeem wordt aangedreven en het continuüm bevindt zich boven deze mode.

Bibliografie

- [1] J. F. Allen and A. D. Misener. Flow of Liquid Helium II. 141(3558):75–75.
- [2] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell. Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor. 269(5221):198–201.
- [3] P. W. Anderson. Random-Phase Approximation in the Theory of Superconductivity. 112(6):1900–1916.
- [4] Juan Sanchez Baena, Ferran Mazzanti Castrillejo, and Artur Polls Marti. Study of quantum scattering T-matrix.
- [5] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer. Theory of Superconductivity. 108(5):1175–1204.
- [6] Hauke Biss, Lennart Sobirey, Niclas Luick, Markus Bohlen, Jami J. Kinnunen, Georg M. Bruun, Thomas Lompe, and Henning Moritz. Excitation Spectrum and Superfluid Gap of an Ultracold Fermi Gas. 128(10):100401.
- [7] N Bogoliubov. On the theory of superfluidity.
- [8] M Bolsterli and J MacKenzie. Determination of separable potential from phase shift. 2(3):141–149.
- [9] S. S. Botelho and C. A. R. Sá De Melo. Quantum Phase Transition in the BCS-to-BEC Evolution of p-wave Fermi Gases. 140(5-6):409–428.
- [10] Quentin Carayol and Francis Collino. Error estimates in the fast multipole method for scattering problems Part 1: Truncation of the Jacobi-Anger series. 38(2):371–394.
- [11] Yvan Castin. Bragg spectroscopy and pair-breaking-continuum mode in a superfluid Fermi gas.
- [12] Y D Chong. Quantum Mechanics III. pages 6.1.2 – 6.1.5.
- [13] Piers Coleman. *Introduction to Many-Body Physics*. Cambridge University Press, 1 edition.
- [14] Leon N. Cooper. Bound Electron Pairs in a Degenerate Fermi Gas. 104(4):1189–1190.
- [15] K. B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. Van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle. Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms. 75(22):3969–3973.

- [16] P. Dyke, S. Musolino, H. Kurkjian, D. J. M. Ahmed-Braun, A. Pennings, I. Herrera, S. Hoinka, S. J. J. M. F. Kokkelmans, V. E. Colussi, and C. J. Vale. Higgs oscillations in a unitary Fermi superfluid.
- [17] D. M. Eagles. Possible Pairing without Superconductivity at Low Carrier Concentrations in Bulk and Thin-Film Superconducting Semiconductors. 186(2):456–463.
- [18] A. K. Fedorov, S. I. Matveenko, V. I. Yudson, and G. V. Shlyapnikov. Novel p-wave superfluids of fermionic polar molecules. 6(1):27448.
- [19] A. K. Fedorov, V. I. Yudson, and G. V. Shlyapnikov. P-wave superfluidity of atomic lattice fermions. 95(4):043615.
- [20] Eduardo Fradkin. *Quantum Field Theory: An Integrated Approach*. Princeton University Press.
- [21] David Goodstein and Judith Goodstein. [No title found]. 2(1):30.
- [22] Yixin Guo and Hiroyuki Tajima. Competition between pairing and tripling in one-dimensional fermions with coexistent s - and p -wave interactions. 107(2):024511.
- [23] V. Gurarie and L. Radzihovsky. Resonantly paired fermionic superfluids. 322(1):2–119.
- [24] Tin-Lun Ho and Roberto B. Diener. Fermion Superfluids of Non-Zero Orbital Angular Momentum near Resonance. 94(9):090402.
- [25] Sascha Hoinka, Paul Dyke, Marcus G. Lingham, Jami J. Kinnunen, Georg M. Bruun, and Chris J. Vale. Goldstone mode and pair-breaking excitations in atomic Fermi superfluids. 13(10):943–946.
- [26] M. Iskin and C. A. R. Sá De Melo. Superfluidity of p -wave and s -wave atomic Fermi gases in optical lattices. 72(22):224513.
- [27] M. Iskin and C. A. R. Sá De Melo. Evolution from BCS to BEC Superfluidity in p -Wave Fermi Gases. 96(4):040402.
- [28] P. Kapitza. Viscosity of Liquid Helium below the lambda-Point. 141(3558):74–74.
- [29] A. A. Kirmani, K. Quader, and M. Dzero. Phase diagram for the trapped p-wave fermionic superfluid with population imbalance. 95(13):134503.
- [30] S. N. Klimin, J. Tempere, and H. Kurkjian. Phononic collective excitations in superfluid Fermi gases at nonzero temperatures. 100(6):063634.
- [31] S. N. Klimin, J. Tempere, T. Repplinger, and H. Kurkjian. Collective excitations of a charged Fermi superfluid in the BCS-BEC crossover. 25(6):063011.
- [32] H. Kurkjian, Y. Castin, and A. Sinatra. Concavity of the collective excitation branch of a Fermi gas in the BEC-BCS crossover. 93(1):013623.
- [33] H. Kurkjian, S. N. Klimin, J. Tempere, and Y. Castin. Pair-Breaking Collective Branch in BCS Superconductors and Superfluid Fermi Gases. 122(9):093403.
- [34] H. Kurkjian, J. Tempere, and S. N. Klimin. Linear response of a superfluid Fermi gas inside its pair-breaking continuum. 10(1):11591.

- [35] Lev Davidovič Landau, Evgenij M. Lifšic, and Lev Davidovič Landau. *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory*. Number Vol. 3 in Course of Theoretical Physics / by L. D. Landau and E. M. Lifshitz. Pergamon Press, 3. ed., rev. and enl., reprinted edition.
- [36] A. J. Leggett. Cooper pairing in spin-polarized fermi systems. 41(C7):C7–19–C7–26.
- [37] A. J. Leggett. Interpretation of Recent Results on He 3 below 3 mK: A New Liquid Phase? 29(18):1227–1230.
- [38] A. J. Leggett. The Superfluid phases of liquid 3He: BCS theory. 24(25):2525–2539.
- [39] Bo Liu, Xiaopeng Li, Biao Wu, and W Vincent Liu. Chiral superfluidity with p-wave symmetry from an interacting s-wave atomic Fermi gas. 5(1):5064.
- [40] F. London. On the Bose-Einstein Condensation. 54(11):947–954.
- [41] Gerald D. Mahan. *Many-Particle Physics*. Physics of Solids and Liquids. Kluwer Academic/Plenum Publishers, 3rd ed edition.
- [42] Teboho Moloi. Spherical Bessel functions.
- [43] Munshi G. Mustafa. An introduction to Thermal Field Theory and Some of its Application. 232(9):1369–1457.
- [44] Yusuke Nishida. Induced p-wave superfluidity in two dimensions: Brane world in cold atoms and nonrelativistic defect CFTs. 324(4):897–919.
- [45] Y. Ohashi. BCS-BEC Crossover in a Gas of Fermi Atoms with a p -Wave Feshbach Resonance. 94(5):050403.
- [46] Bart Partoens. *Gevorderde Kwantummechanica*, volume 2022–2023. Universiteit Antwerpen.
- [47] O. Penrose. CXXXVI. On the quantum mechanics of helium II. 42(335):1373–1377.
- [48] Oliver Penrose and Lars Onsager. Bose-Einstein Condensation and Liquid Helium. 104(3):576–584.
- [49] C. A. Regal, M. Greiner, and D. S. Jin. Observation of Resonance Condensation of Fermionic Atom Pairs. 92(4):040403.
- [50] M.R. Schafroth, S.T. Butler, and J.M. Blatt. Quasichemical equilibrium approach to superconductivity. 30 (1957): 93-134.
- [51] Carlos A. R. Sá De Melo. When fermions become bosons: Pairing in ultracold gases. 61(10):45–51.
- [52] J. Tempere, S. N. Klimin, J. T. Devreese, and V. V. Moshchalkov. Imbalanced d -wave superfluids in the BCS-BEC crossover regime at finite temperatures. 77(13):134502.
- [53] Jacques Tempere. *Bose-Einstein Condensation, Superfluidity and Superconductivity*. Universiteit Antwerpen.
- [54] Jacques Tempere. *Course Notes for Solid State Physics II (Quantum Many-Body Theory of the Solid State)*, volume 2022–2023. Universiteit Antwerpen.

- [55] Jacques Tempere. *Quantum Field Theory*, volume 2022–2023. Universiteit Antwerpen.
- [56] Jacques Tempere. Solitons as Probes of Collective Modes in Superfluid Fermi Gas (Laser Physics 2018).
- [57] Jacques Tempere and Jeroen P.A. Path-Integral Description of Cooper Pairing. In Alexander Gabovich, editor, *Superconductors - Materials, Properties and Applications*. InTech.
- [58] Tobias Tiecke. Feshbach resonances in ultracold mixtures of the fermionic quantum gases 6Li and 40K.
- [59] Päivi Törmä. Physics of ultracold Fermi gases revealed by spectroscopies. 91(4):043006.
- [60] Wout Van Alphen. *Dynamica En Verval van Solitaire Excitatie in Superfluïde Fermi Gassen*. Universiteit Antwerpen.
- [61] Dirk Van Delft and Peter Kes. The discovery of superconductivity. 63(9):38–43.
- [62] Senne Van Loon, Jacques Tempere, and Hadrien Kurkjian. *Padintegraalbeschrijving van Excitatie in Superfluïde Fermi Gassen*, volume 2020. Universiteit Antwerpen.
- [63] Vijin Venu, Peihang Xu, Mikhail Mamaev, Frank Corapi, Thomas Bilitewski, Jose P. D’Incao, Cora J. Fujiwara, Ana Maria Rey, and Joseph H. Thywissen. Unitary p-wave interactions between fermions in an optical lattice. 613(7943):262–267.
- [64] Zeqing Wang and Ran Qi. Single-particle spectroscopies of p-wave and d-wave interacting Bose gases in normal phase. 76(5):055501.
- [65] Michiel Wouters. *Complexe Analyse En Speciale Functies*, volume 2022–2023. Universiteit Antwerpen.
- [66] J. Zhang, E. G. M. Van Kempen, T. Bourdel, L. Khaykovich, J. Cubizolles, F. Chevy, M. Teichmann, L. Tarruell, S. J. J. M. F. Kokkelmans, and C. Salomon. P -wave Feshbach resonances of ultracold Li 6. 70(3):030702.
- [67] LiHong Zhou, Wei Yi, and XiaoLing Cui. Fermion superfluid with hybridized s- and p-wave pairings. 60(12):127011.
- [68] Wilhelm Zwerger, editor. *The BCS-BEC Crossover and the Unitary Fermi Gas*, volume 836 of *Lecture Notes in Physics*. Springer Berlin Heidelberg.