



**Universiteit
Antwerpen**

*Faculteit Wetenschappen
Departement Fysica
Academiejaar 2024-2025*

Thesis ingediend ter verkrijging van
de graad Master in de Fysica.

Het Effectieve Drie-Deeltjes Probleem in een Bosonisch Systeem

Auteur : Corinne Beckers

Promotors : Prof. Dr. Jacques Tempere & Dr. Denise Ahmed-Braun

26 mei 2025

Abstract (in English)

Effective field theories (EFTs) are often successfully applied to study many-body systems. In these approaches, essential (or even universal) features of two-body interactions are incorporated through a contact interaction term in order to correctly capture the microscopic details of the system. However, when analyzing three-body processes in such systems, EFT's that include only two-body contact interactions lead to unnatural divergences in the theory. This is a direct consequence of the use of contact interactions, where divergences in momentum integrals can only be resolved by renormalizing the theory. Within the framework of EFT, this can be addressed at the three-body level by introducing an effective three-body contact interaction with strength g_3 . In this approach, however, g_3 is treated as a renormalization parameter that depends solely on a momentum cutoff Λ .

In this thesis, the interpretation of a contact three-body interaction as merely a renormalization parameter will be re-evaluated. Instead of using a contact interaction, this work employs a separable potential. This approach is justified by the mathematical fact that any interaction potential can be approximated as a sum of separable terms. In such a formulation, the two-body interaction is expressed as a product of terms that depend only on a single coordinate, which significantly simplifies the calculations. In this project, we restrict ourselves to a single separable term to study, in the most rudimentary way, the effect of an interaction range on the natural emergence of an effective three-body interaction. Contact interactions are momentum-dependent and do not induce an intrinsic length scale into the systems, which ultimately allows momenta to grow arbitrarily large. This is not the case for separable potentials, which do introduce a characteristic length scale or range into the potential. As a consequence, when particles have a relative momentum approaching infinity, they are considered non-interacting. The separable potential used in this work has an interaction strength g , and employs step functions that allow for a straightforward definition of an upper bound on the momenta of the interacting particles. This method thus avoids divergent integrals and enables a treatment of the three-body problem that is free from regularization and renormalization.

In this approach, the Storniakov-Ter-Martirosian (STM) equation is reformulated for the separable potential. This equation describes the behavior of three interacting particles. The goal is to understand how three particles scatter under a separable interaction, which is captured by the quantity known as the three-body scattering amplitude $\mathcal{A}_s(p, k, E)$. This will be developed both analytical and numerically. To achieve this, we make use of the Faddeev decomposition, which allows the problem to be reduced by considering only pairwise interactions between particles. Through this method, an integral equation for the scattering amplitude is obtained, which can then be solved. Subsequently, our results are compared with studies from the literature on EFTs with contact interactions. Several similarities are found between the contact interaction approach and our separable model. Additionally, we derive the relation between the two-body and three-body interaction strengths in the strongly interacting regime. This study therefore demonstrates how a theory with a finite range at the two-body level naturally gives rise to an effective three-body interaction, without the need for renormalization. A separable potential thus offers a systematic way to address the three-body problem in the low-energy limit, avoiding the necessity for regularization or renormalization.

Abstract (in het Nederlands)

Effectieve veldtheorieën (EFTs) worden vaak succesvol toegepast om veeldeeltjessystemen te bestuderen. Hierbij worden belangrijke (of zelfs universele) kenmerken van twee-deeltjesinteracties opgenomen in de vorm van een contact interactie term om de microscopische details van het systeem correct weer te geven. Echter, wanneer drie-deeltjes processen in dergelijke systemen worden geanalyseerd, leiden EFTs met enkel twee-deeltjes contact interacties tot onnatuurlijke divergenties in de theorie. Dit is een direct gevolg van het gebruik van contact interacties, waarbij divergenties in momentum integralen slechts kunnen worden verholpen door een renormalisatie van de theorie. In termen van de EFT kan dit op drie-deeltjes niveau worden gedaan door het introduceren van een effectieve drie-deeltjes contact interactie met sterkte g_3 . Echter, in deze werkwijze wordt g_3 beschouwd als een renormalisatie parameter, die enkel afhangt van een momentum cutoff Λ .

In deze thesis zal de interpretatie van een contact drie-deeltjes interactie als renormalisatie parameter herzien worden. In plaats van een contact interactie wordt in dit verslag gewerkt met een separabele potentiaal. Dit is verantwoord sinds elke interactiepotentiaal wiskundig benaderd kan worden als een som van separabele termen. Hierbij wordt de twee-deeltjesinteractie geschreven als het product van termen die slechts van één coördinaat afhangen, wat de berekeningen hard vereenvoudigt. In dit project beperken we ons tot één enkele separabele term om te bestuderen wat op de meest rudimentaire manier het effect is van een interactie range op het natuurlijk bekomen van een effectieve drie-deeltjes interactie. Contact interacties zijn momentum afhankelijk en introduceren geen intrinsieke nieuwe lengteschaal in het systeem, wat uiteindelijk leidt tot momenta die oneindig groot kunnen worden. Bij een separabele potentiaal is dit niet zo, en wordt er wel een lengteschaal of range geïntroduceerd in de potentiaal. Deze zorgt er dan voor dat wanneer deeltjes een relatief momentum bezitten dat naar oneindig nadert, er wordt beschouwd dat deze deeltjes niet interageren. De separabele potentiaal die hier gebruikt wordt heeft een interactiesterkte g , waarbij stapfuncties worden geïntroduceerd waardoor er makkelijk een bovengrens kan gedefinieerd worden op de momenta van de interagerende deeltjes. Deze manier van werken vermijdt dus divergente integralen, wat er ook voor zorgt dat het drie-deeltjes probleem dus vrij behandeld kan worden van regularisatie en renormalisatie.

In deze werkwijze worden de Storniakov-Ter-Martirosian (STM)-vergelijkingen geherformuleerd voor deze potentiaal. Dit is een vergelijking welke het gedrag van drie interagerende deeltjes beschrijft. Het doel is namelijk om te begrijpen hoe drie deeltjes met elkaar kunnen verstrooien onder een separabele potentiaal, en die informatie zit bevat in de grootte die de drie-deeltjes verstrooiingsamplitude $\mathcal{A}_s(p, k, E)$ wordt genoemd. Dit zal zowel analytisch als numeriek uitgewerkt worden. Om dit te realiseren wordt er gebruik gemaakt van de Faddeev decompositie. Meer specifiek zal hierbij beschouwd worden dat de drie deeltjes alleen interageren met elkaar via paarsgewijze interacties. Via deze methode volgt uiteindelijk een integraalvergelijking voor de verstrooiingsamplitude welke opgelost kan worden. Nadien worden onze resultaten vergeleken met literatuurstudies over EFTs met contact interacties. Hierbij worden meerdere overeenkomsten gevonden tussen de contact interactie en ons separabel model. Verder wordt ook het verband afgeleid tussen de twee- en drie-deeltjes interactiesterktes in het sterk interagerend regime. Onze studie laat hier dus zien hoe een theorie met een welbepaalde range op twee-deeltjes niveau natuurlijk leidt tot een effectieve drie-deeltjes interactie, waarbij geen renormalisatie van de theorie nodig is. Een separabele potentiaal biedt dus in de lage-energie limiet een manier om het drie-deeltjes probleem op een systematische wijze te behandelen zonder de nood aan regularisatie of renormalisatie schema's.

Dankwoord

In deze sectie zou ik graag een aantal mensen willen bedanken, want zonder hun hulp zou deze thesis nooit tot stand zijn gekomen.

Allereerst Denise, super hard bedankt om mij te begeleiden in de wereld van de effectieve drie-deeltjes fysica. Bedankt dat je elke week tijd maakte voor dit project, voor je eindeloze geduld, je altijd eerlijke feedback, maar vooral voor de fijne samenwerking (en soms een paar grapjes tussendoor 🦒). Je steun betekende echt veel voor mij.

Daarnaast ben ik professor Tempere bijzonder dankbaar voor zijn inhoudelijk input, inspirerende ideeën en voor de kans om mij in dit onderwerp te mogen verdiepen. Bedankt voor het vertrouwen dat u mij gaf om zelfstandig en met een eigen inbreng aan dit project te werken. Ik heb er enorm veel uit geleerd doorheen de voorbije twee jaar en vond het een bijzonder boeiend traject.

Tot slot zou ik ook heel graag mijn vriend William willen bedanken voor alle steun en voor de hulp met de supercomputer. Ik kon altijd op je rekenen, en daar ben ik je super dankbaar voor.

Dankjulliewel!

Inhoudsopgave

1	Inleiding	1
1.1	De effectieve veldentheorie	2
1.2	Separabele potentialen	3
1.3	Feshbach resonanties	5
1.4	Efimov Fysica	6
1.5	Outline	8
2	De Basis van de Verstrooiingstheorie	9
2.1	Lippmann-Schwinger vergelijking	11
2.2	Methode van de partiële golven	13
2.3	Harde sfeer verstrooiing	15
2.4	Samenvatting van lage-energie verstrooiing	16
3	Het Twee-Deeltjes Probleem	19
3.1	De contact interactie	19
3.2	Separabele interacties	22
3.3	Separabele T-matrix	25
3.4	Cutoff afhankelijkheid van a en R_{eff}	26
3.5	Het twee-kanalen model	27
3.5.1	Cutoff afhankelijkheid van a en R_{eff} in het twee-kanalen model	33
4	Het Drie-Deeltjes Probleem	34
4.1	De truc met het paarveld	34
4.2	Hubbard-Stratonovic transformatie	36
4.3	Analogie met het twee-kanalen model	39
4.4	Veelkanalen verstrooiingen	40
4.5	Jacobi coördinaten systeem	42
4.6	Drie-deeltjes transitie matrix	44
5	Drie-Deeltjes Verstrooiingsamplitude	47
5.1	Regimes van de verstrooiingsamplitude	56
5.2	Vergelijking met de contact interactie	57
5.3	Analytische limiet	59
5.4	Numerieke vergelijking	61
5.4.1	Efimov fysica	62
5.4.2	Verstrooiingsamplitudes	65
5.4.3	Bijkomende opmerkingen	70
6	Conclusie en Outlook	73

1 Inleiding

Interacties tussen deeltjes vormen één van de meest fundamentele principes uit de fysica. Van botsingen uit de kernfysica tot interacties in Bose-Einstein condensaten en superfluida, overal spelen deze een cruciale rol. Echter wordt er vaak enkel gekeken naar het niveau van twee-deeltjes interacties. Dit is vaak verantwoord aangezien voor systemen met lagere dichtheid of systemen bij koude temperaturen interacties tussen meerdere deeltjes statistisch gezien minder vaak voorkomen. Hierbij vormen de twee-deeltjes interacties de dominante leidende-orde bijdrage en kunnen de interacties met drie of meer deeltjes beschouwd worden als hogere orde verwaarloosbare termen [1].

De fundamentele interacties tussen deeltjes worden vaak als twee-deeltjes krachten beschouwd, maar in veel-deeltjes systemen kunnen vaak ook *effectieve* veel-deeltjes interacties ontstaan. Deze zijn het resultaat van meerdere paarsgewijze interacties tussen deeltjes. Zo kunnen er bijvoorbeeld effectieve drie-deeltjes interacties ontstaan, waarvan het onderliggende interactiemechanisme nog gebaseerd is op twee-deeltjes interacties. Deze effectieve drie-deeltjes interacties kunnen dan verder leiden tot nieuwe fenomenen die niet voorkomen in de pure twee-deeltjes systemen, zoals bijvoorbeeld nieuwe evenwichtsvoorwaarden of de vorming van drie-deeltjes gebonden toestanden (trimers) [2–4].

Een goed voorbeeld waarin deze drie-deeltjes interacties bestudeerd kunnen worden zijn ultrakoude gassen. Aangezien atomen in deze gassen weinig energie hebben, worden interacties waarbij deeltjes moeten tunnelen door een centrifugaalbarrière sterk onderdrukt. Voor bosonische gassen, waar we in deze thesis op zullen focussen, heeft dit tot gevolg dat de symmetrische *s*-golf verstrooiing tussen deeltjes vaak dominant zal zijn. Deze interacties worden voor deze ultrakoude en ijle gassen dan goed getypeerd door een interactiesterkte g , welke lineair gerelateerd is aan de *s*-golfverstrooiingslengte a_s . Dit is een belangrijke grootte van het systeem, sinds het in verband staat met fysische grootheden zoals de totale cross-sectie σ via het verband $\sigma = 4\pi a^2$ [5].

Één van de belangrijkste eigenschappen van ultrakoude gassen is dat de mate van onderlinge interactie tussen de deeltjes experimenteel afgesteld kan worden. Dit kan worden gedaan door gebruik te maken van het mechanisme van Feshbach resonanties. Hierbij wordt de interactie sterkte tussen deeltjes aangepast door variatie van een extern magneetveld. Hierdoor kunnen interacties in het systeem dus zowel aantrekkelijk of afstotelijk worden, waardoor het dus ideaal is om hierin de fysica van verschillende regimes te bekijken. Wanneer de verstrooiingslengte veel groter wordt dan de andere lengteschalen, dus groter dan de interdeeltjes afstand en de reikwijdte van de potentiaal, dan bevindt het systeem zich in het *unitaire regime*. Dit wordt dus getypeerd door $1/a \rightarrow 0$.

In bosonische systemen herkent men in het unitaire regime het bijzondere *Efimov effect*. [6–11]. Dit is een proces waarbij er een oneindige reeks aan drie-deeltjes gebonden toestanden ontstaat, de zogenaamde Efimov trimers. Het bestaan van deze speciale trimers is onafhankelijk van de aanwezigheid van onderliggende twee-deeltjes, ofwel dimer, toestanden. In het gesymmetriseerde geheel kan het Efimov effect geïnterpreteerd worden als het effect waarbij het ‘derde’ deeltje de interactie tussen de ‘partnerdeeltjes’ faciliteert. Wanneer er geen dimer toestand is, dan wordt er vaak naar deze trimers verwezen als ‘Borromean trimers’, wat aangeeft dat de drie-deeltjes toestand zal opbreken in drie vrije deeltjes wanneer slechts één van de drie atomen wordt weggehaald [12]. Bovendien vertonen deze Efimov toestanden ook een discrete schaalinvariantie, aangezien de energieën van de bindingstoestanden volgens een geometrische reeks zijn gerangschikt [13, 14].

In het hedendaagse onderzoek zijn veel-deeltjes interacties ook belangrijker aan het worden. Dankzij experimentele technieken zoals magneto-optische vallen en Feshbach resonanties [1, 15–18] is het vandaag mogelijk om ultrakoude gassen te brengen in een regime waar effectieve drie-deeltjes inter-

acties dominant worden. Daarom zijn zulke kwantumgassen uitstekend geschikt om de theoretische modellering van drie-deeltjes interacties te gaan testen. Het doel van deze thesis is precies om een theoretische beschrijving van drie-deeltjes interacties op te stellen voor identieke bosonen. Hierbij zal dit niet als interactie worden gezien waarbij de drie deeltjes zich precies op dezelfde plaats moeten bevinden, maar zal bekeken worden hoe deze effectieve drie-deeltjes botsingen afhangen van de twee-deeltjes interacties. Concreet wil dit zeggen dat er geen contact interactie beschouwd zal worden, zoals in effectieve veldentheorieën wel het geval is. In plaats daarvan wordt er gebruik gemaakt van een simpele separabele potentiaal, die rekening houdt met de reikwijdte (of ‘range’) van de interactie. In subsectie 1.2 zal de theoretische beschrijving hiervan in meer detail besproken worden. Eerst zal nu gefocust worden op het nader bestuderen van effectieve veldentheorieën.

1.1 De effectieve veldentheorie

Het algemene framework waarin effectieve drie-deeltjesinteracties bestudeerd worden, is dat van een *effectieve veldentheorie* (EFT) [19–22]. Dit is een methode die toelaat om voorspellingen te maken over de fysica van het veeldeeltjessysteem zonder dat de details van de microscopische theorie gekend moeten zijn. Meer specifiek wordt dit gerealiseerd door enkel de relevante vrijheidsgraden te behouden die nodig zijn binnen het gewenste energie- of lengteschaalregime waarin wordt gewerkt. Hierbij wordt een Lagrangiaan opgesteld die alle mogelijke interacties bevat die toegestaan zijn volgens de symmetrieën en eigenschappen van het beschouwde systeem. Elke term of interactie gaat gepaard met een eigen sterkte, de zogenaamde *koppelingsconstante*, die in principe onbekend is en theoretisch of experimenteel bepaald moet worden. Vervolgens wordt er een expansie gemaakt in machten van de energie of momentum, welke afgebroken kan worden van zodra de gewenste precisie is bereikt. Dit wilt zeggen dat de bijdrage van de hogere orde termen dus kleiner zijn dan de nauwkeurigheid waarmee met het systeem wilt beschrijven.

Een algemene effectieve Lagrangiaan voor interagerende identieke bosonen die rekening houdt met drie-deeltjes verstrooiingen heeft de volgende vorm [2, 23, 24]

$$\mathcal{L} = \psi^\dagger \left(i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2} \nabla^2 \right) \psi - \frac{g_2}{4} (\psi^\dagger \psi)^2 - \frac{h_2}{4} \nabla (\psi^\dagger \psi) \nabla (\psi^\dagger \psi) - \frac{g_3}{36} (\psi^\dagger \psi)^3 + \dots, \quad (1.1)$$

waarbij de puntjes verwijzen naar hogere orde termen die hier niet verder in rekening zullen worden gebracht. In deze formule, en in de rest van deze thesis, gebruiken we eenheden waarbij $\hbar = m = 1$. De eerste term in vergelijking (1.1) beschrijft de kinetische energie van de bosonen, gevolgd door een twee-deeltjes contact interactie met sterkte g_2 , nadien een term h_2 die rekening houdt met de effectieve dracht, en tot slot de drie-deeltjes contact interactie met sterkte g_3 . Voor ons systeem van identieke bosonen, schaalt de interactiesterkte g_2 lineair met de verstrooiingslengte a . De factor h_2 kan gerelateerd worden aan het effect van een eindige dracht van de interactie, welke direct kan worden geparametriseerd door *effectieve range/dracht* r_e [25–27].

Wanneer alleen naar het twee-deeltjes niveau wordt gekeken met de contact interactie, dan blijven dus enkel de kinetische term en de g_2 term over. Voor deze Lagrangiaan kunnen expansies gemaakt worden in ordes van de interactiesterkte, waarbij de interactie processen kunnen worden gevisualiseerd met behulp van *Feynman diagrammen*. Hierbij verschijnen ook hogere-orde diagrammen met loops of lussen, welke integralen zullen introduceren over de loopmomenta [28, 29]. Echter het grote probleem met deze methode waarbij slechts een contact interactie wordt beschouwd, is dat deze integralen divergeren in de limiet van grote momenta [30–33]. In het EFT framework wordt dit probleem opgelost door een *regularisatie en renormalisatie* schema door te voeren [34–37].

De eerste stap is de regularisatie, waarbij er een momentum *cutoff* Λ geïntroduceerd wordt die zorgt voor een bepaalde bovengrens op de gebruikte integralen. Door een eindige waarde voor Λ te kiezen, wordt de niet-fysische divergentie van de integralen op deze manier voorkomen. Fysisch betekent dit dat wanneer de interagerende deeltjes een relatief momentum hebben dat groter is dan de cutoff, de deeltjes als niet-interagerend worden beschouwd. Maar, door deze cutoff te introduceren, wordt het systeem expliciet afhankelijk van deze *extra* parameter. De tweede stap is dan de renormalisatie, waarbij er een oorspronkelijke parameter (zoals g_2) wordt opgeofferd door deze te laten afhangen van de cutoff. Dit moet op een precieze manier worden gedaan zodat de andere parameters nadien niet meer afhankelijk van zijn van Λ , en zodat deze nog steeds de juiste fysische grootheden voorstellen. Stel dat de interactiesterkte g_2 afhankelijk gemaakt wordt van de cutoff. Aangezien de vorm van de verstrooiingsamplitude gekend is in de energie $E \rightarrow 0$ limiet, dan kan een relatie gevonden worden tussen g_2 en Λ . Dit is dan de gerenormaliseerde vorm van de twee-deeltjes interactiesterkte $g_2(\Lambda)$ [2, 38–40].

Dat de regularisatie en de gerenormaliseerde interactie sterkte $g_2(\Lambda)$ de EFT divergentievrij maakt op het niveau van twee-deeltjes verstrooiing, wil echter nog niet zeggen dat de EFT vrij van divergenties zal zijn voor verstrooiingsprocessen waarbij meer dan twee deeltjes mee doen. Zodoende, als men scattering tussen drie deeltjes beschouwt, zullen er integralen zijn over andere loopmomenta, welke leiden tot andere soort divergenties die niet worden verholpen door de introductie van de gerenormaliseerde interactie sterkte $g_2(\Lambda)$. Om deze nieuwe divergenties te verhelpen moet daarom een extra koppelingsconstante g_3 aan de EFT toegevoegd worden. Het is echter belangrijk om te beseffen dat deze parameter niet als onafhankelijk van g_2 en de cutoff beschouwd kan worden.

De drie-deeltjes contact parameter g_3 zal dus afhankelijk zijn van wat er gebeurt op het niveau van twee-deeltjes interacties. De centrale grootheid die in deze thesis zal berekend worden, zoals ook al eerder werd aangehaald, is de (twee- en drie deeltjes) *verstrooiingsamplitude*. Deze beschrijft de kwantummechanische amplitude dat twee (of drie) deeltjes met bepaalde relatieve momenta en energieën met elkaar interageren tijdens een botsing. Zonder hier in al te veel detail te gaan, is deze gerelateerd aan de totale *Greense functie* van het systeem [23, 26, 34]. Deze stelt dus eigenlijk een soort som voor van alle mogelijke diagrammen waarin twee (of drie) deeltjes met elkaar kunnen wisselwerken [29, 41].

Het doel van deze thesis is om te laten zien hoe de effectieve drie-deeltjes interactie, met sterkte g_3 , welke in de EFT moet worden geïmplementeerd om deze renormaliseerbaar te houden, op drie-deeltjes niveau *natuurlijk* voorkomt in de analyse van de drie-deeltjes scattering amplitude voor microscopische twee-deeltjes interacties met eindige dracht. In tegenstelling tot het gebruik van contact interacties, vereisen interacties met eindige dracht geen renormalisatie van de scattering theorie. Door de natuurlijke inclusie van een lengteschaal in deze potentialen (of momentum schaal in reciproke ruimte), zijn deze systemen automatisch goed genormaliseerd. In deze thesis zullen wij ons focussen op de meest eenvoudige (separabele) potentiaal met eindige dracht die verder zal worden toegelicht in de volgende sectie. We zullen hier werken in de *sterk-interagerende limiet*. Dit is het regime waarbij de twee-deeltjes verstrooiingslengte a veel groter wordt dan de andere lengteschalen. Hiervoor geldt dus dat $1/a \ll p \ll \Lambda$ [26]. Verder zal ook altijd in de limiet gekeken worden van energie gaande naar nul, $E \rightarrow 0$.

1.2 Separabele potentialen

Het beschouwen van een contact interactie is een goede benadering wanneer alle lengteschalen van het systeem, zoals bijvoorbeeld de verstrooiingslengte a , veel groter zijn dan de range r_0 van de potentiaal [1, 15, 16]. Nu, het hele probleem dat resulteert uit de contact interacties is het feit dat deze

geen intrinsieke lengteschaal introduceren. De afwezigheid van een natuurlijke lengteschaal heeft tot gevolg dat de aanwezige onbegrensde (momentum) integralen divergeren en de theorie dient te worden genormaliseerd. Echter zou dit allemaal niet moeten gebeuren wanneer er al vanaf de start een potentiaal wordt beschouwd met een bepaalde interactie range. Dit zal de manier zijn waarop het in deze thesis gedaan wordt, en de potentiaal die hiervoor gebruikt zal worden is een *separabele potentiaal* [42].

In principe kan elke realistische potentiaal worden geschreven als een som over separabele potentialen. Een van de veelgebruikte manieren om een separabele vorm van de potentiaal te bekomen is de methode van Ernst, Shakin en Thaler (de EST methode) [43]. In deze methode begint men met de volgende ansatz

$$V_{sep} = \sum_{ij} V |\psi_{k_i}\rangle g_{ij} \langle \psi_{k_j}| V, \quad (1.2)$$

waarbij de sommatie loopt over de verschillende energieën E_i en E_j . De separabele termen in de bovenstaande vgl. zijn zo gedefinieerd dat de Hamiltoniaan met de separabele potentiaal dezelfde eigenenergie geeft wanneer deze inwerkt op een van de eigenstoestanden $|\psi\rangle$ als de originele potentiaal. In deze thesis limiteren we ons tot de meest eenvoudige EST potentiaal door maar een enkele term in de expansie van vergelijking (1.2) te beschouwen. Hiermee is onze separabele potentiaal dan wellicht geen kwantitatieve correcte weerspiegeling van een meer realistische (van der Waals) interactie potentiaal, maar het behoudt het karakter dat voor ons belangrijk is; namelijk de aanwezigheid van een intrinsieke lengteschaal.

Als we ons limiteren tot een potentiaal waarbij we slechts *één* term behouden, reduceert vergelijking (1.2) tot

$$V_{sep} = V |\psi_{\mathbf{k}}\rangle g \langle \psi_{\mathbf{k}}| V \quad (1.3)$$

$$= g |\xi\rangle \langle \xi|. \quad (1.4)$$

In deze uitdrukkingen worden de brakets $|\xi\rangle = V |\psi(\mathbf{k})\rangle$ de *vormfactoren* genoemd, en wordt $g = 1/\langle \psi_{\mathbf{k}}|V|\psi_{\mathbf{k}}\rangle$ de *interactiesterkte* genoemd. De uitdrukking voor de vormfactor wanneer deze wordt geprojecteerd op een momentum toestand kan afgeleid worden uit een expansie in partiëelgolven van een korte-dracht potentiaal [42]. Voor 3D systemen wordt een ‘korte-dracht’ potentiaal gedefinieerd als een potentiaal die afneemt zoals $1/r^3$ of sneller. Wanneer we een separabele-vorm approximatie maken op de potentiaal, dan weten we dat voor *s*-golf interacties de vormfactoren tot op laagste orde constant zijn [42]:

$$\langle k|\xi\rangle \underset{k \rightarrow 0}{=} C(\Lambda) + \mathcal{O}(k^2), \quad (1.5)$$

met C hierbij een constante. Dus we kiezen een vormfactor die constant is in de limiet van $k \rightarrow 0$. Met deze potentiaal kan dan gematcht worden aan de verstrooiingsparameters, dus de cutoff wordt vervolgens wel zo gekozen opdat deze zou overeenkomen met een echte range van een potentiaal. Dus voor dit geval wordt voor een vormfactor gekozen met een stapfunctie in de cutoff:

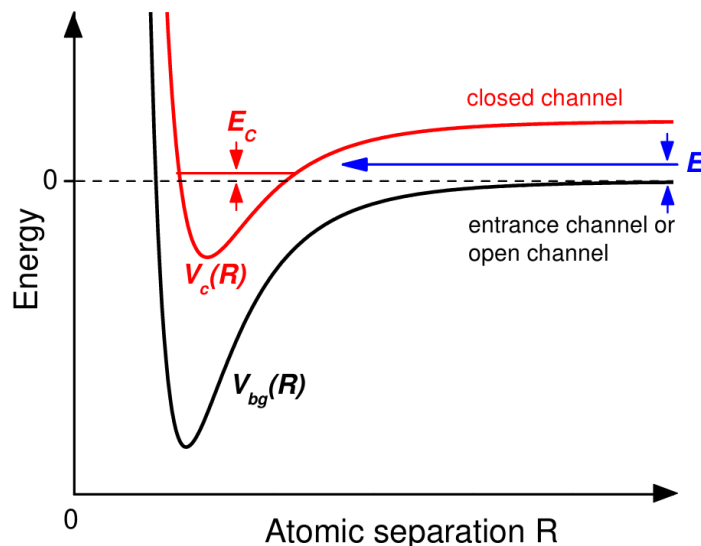
$$\langle \mathbf{k}|\xi\rangle = \xi(k) = \Theta(\Lambda - k). \quad (1.6)$$

Hierbij stelt de functie Θ de Heaviside of stapfunctie voor, en Λ de momentum cutoff. Voor alle momenta groter dan Λ wordt dus beschouwd dat er geen verstrooiingen zijn. In deze thesis zullen we de analyses van de twee- en drie-deeltjes verstrooiingsamplitudes zoals in [2] herhalen met een potentiaal die separabel is. Hieruit kan dan een verband afgeleid worden tussen de contact interactiesterktes g_2 , g_3 en de separabale interactiesterkte g .

1.3 Feshbach resonanties

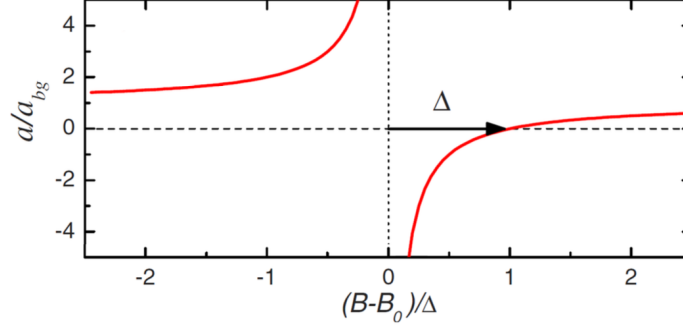
In de context van botsingen tussen meerdere deeltjes wordt vaak gewerkt met een multi-kanaal-systeem. Wanneer twee deeltjes ver van elkaar verwijderd zijn en niet wisselwerken, kan de totale toestand van het twee-deeltjes systeem worden geschreven als het product van de één-deeltjes toestanden. Bijvoorbeeld; voor alkali atomen in de afwezigheid van magnetische velden zou men de hyperfijn kwantumgetallen van de aparte toestanden kunnen gebruiken, als labels van twee-deeltjes ‘kanalen’. Echter, wanneer de deeltjes gaan wisselwerken, zullen de interacties niet diagonaal zijn in deze twee-deeltjes product basis. Als gevolg daarvan zullen interactie kanalen mengen. Dat wil zeggen dat twee atomen die elkaar naderen in een welbepaald kanaal ook zullen koppelen aan de andere kanalen [12, 44–47].

De koppeling tussen kanalen leidt tot het Feshbach mechanisme. Dit wordt visueel voorgesteld voor twee kanalen in figuur 1. De zwarte curve stelt hierbij het *open kanaal* voor. Deze heeft een asymptotische energie (E op grote interatomaire afstand R) kleiner of gelijk aan $E = 0$ (zwarte stippellijn), waardoor het dus toegankelijk is voor het deeltje om in deze potentiaal binnen te gaan of buiten te gaan. De rode lijn stelt een gesloten kanaal voor, welke een gebonden toestand bevat met een energie E_c gemeten ten opzichte van het punt $E = 0$. Dit kanaal heeft een asymptotische energie boven het begin niveau. Door het tekort aan energie zijn deeltjes niet in staat om dit kanaal asymptotisch vrij te verlaten. Echter wanneer de twee kanalen zo getuned worden dat de energie van de gebonden toestand in het gesloten kanaal resonant wordt met de energie van de interagerende deeltjes in het open kanaal, dan spreekt men van een Feshbach resonantie [44, 45]. Hierbij divergeert de verstrooiingslengte en wordt dus ook de werkzame doorsnede (cross-sectie) oneindig groot. Rond het resonante punt zullen de deeltjes de gebonden toestand E_c sterk voelen en zodoende sterk wisselwerken.



Figuur 1: Voorstelling van het twee-kanalen model. De rode lijn stelt hierbij de potentiaal V_c van het gesloten kanaal voor, welke een gebonden toestand bevat met energie E_c . De zwarte lijn stelt de potentiaal V_{bg} voor van het open kanaal. De energie van de botsing wordt voorgesteld door E . Figuur overgenomen uit [45].

Zoals eerder vermeld, komen de twee kanalen overeen met twee verschillende producten van één-deeltjes (hyperfijn) toestanden. Hierdoor hebben de twee kanalen dus ook een verschillend magne-



Figuur 2: Voorstelling van het verband tussen de verstrooiingslengte a en het magneetveld B . Wanneer $B = B_0$ dan treedt er een resonantie op en divergeert de verstrooiingslengte. Δ stelt hierbij de magnetische breedte van de resonantie voor. Figuur overgenomen uit [45].

tisch moment. Dit verschil maakt het mogelijk dat het energie verschil tussen de gebonden toestand en de begin energie experimenteel aangepast kunnen worden via een extern magneetveld. Dus, door dit magneetveld aan te passen zodat de gebonden toestand in resonantie komt met het open kanaal, kan men effectief de interactiesterkte die deeltjes voelen aanpassen, en Feshbach resonanties laten optreden. Aangezien de tuning van het magneetveld de interactiesterkte tussen de deeltjes verandert, impliceert dat ook direct dat deze manipulatie een effect heeft op de verstrooiingslengte a . Dit staat visueel weergegeven in figuur 2. Wanneer het magneetveld B gelijk wordt aan de resonante waarde B_0 , dan divergeert de verstrooiingslengte. Deze kan zelfs veranderen van teken waardoor de interacties wisselen van aantrekkend naar repulsief. Het verloop van de verstrooiingslengte dicht bij de resonantie wordt gegeven door [45]

$$a(B) = a_{bg} \left(1 - \frac{\Delta}{B - B_0} \right). \quad (1.7)$$

Hierbij stelt a_{bg} de achtergrond verstrooiingslengte voor, wat overeenkomt met de verstrooiingslengte van alleen het open kanaal zonder koppeling naar het gesloten kanaal [12], Δ de magnetische breedte van de resonantie en B_0 de waarde van het veld waarbij de Feshbach resonantie gebeurt. Hoe het teken van de verstrooiingslengte relateert aan de aantrekking/repulsie van de atomen zal verder worden toegelicht in sectie (2.3).

1.4 Efimov Fysica

Zoals eerder aangehaald in de inleiding kan het beschouwen van drie-deeltjes interacties leiden tot interessante nieuwe fenomenen. Een voorbeeld hiervan is Efimov fysica. Dit werd voor het eerst voorgesteld in 1970 door Vitaly Efimov [10, 11]. Hij voorspelde theoretisch dat voor drie identieke bosonen met $r_0 \ll a$ er een oneindige geometrische reeks aan drie-deeltjes gebonden toestanden ontstaat in het unitair regime voor een korte-drachtpotentiaal met range r_0 . Herinner dat dit in drie dimensies overeenkomt met een potentiaal die afvalt zoals $1/r^3$ of sneller. De voorspelling van Efimov werd later experimenteel bevestigd in de context van ultrakoude atomaire gassen [8, 14, 48]. Zoals ook al eerder werd aangehaald zijn de zogenoemde Efimov trimers speciaal, aangezien ze niet alleen geometrisch schalen, maar ook kunnen bestaan zonder dat er ook twee-deeltjes gebonden toestanden kunnen voorkomen.

In figuur 3 staat het Efimov spectrum voorgesteld. Op de horizontale as staat de inverse verstrooiingslengte en op de verticale as staat het golfgetal weergegeven. Hier zijn de Efimov trimers

voorgesteld door de rode lijnen. Het universele karakter van de trimers is hier duidelijk zichtbaar aangezien alle trimers met eenzelfde factor met elkaar verschillen. Door deze universele schaling is het mogelijk om het hele spectrum vast te leggen met behulp van de drie-deeltjes parameter [49]. Het drie-deeltjes getal kan gebruikt worden om de positie van de grondtoestand vast te leggen. Hierbij zijn er meerdere keuzes mogelijk, bijvoorbeeld de scatteringlengte waarop de grondtoestand opgaat in het trimer continuum (a_-), het golfgetal van de grondtoestand op resonantie (κ_*) of de scattering lengte waarbij de Efimov trimer uiteenvalt in een dimer en vrij deeltje (a_*). De trimer golfgetallen zijn gedefinieerd volgens de relatie

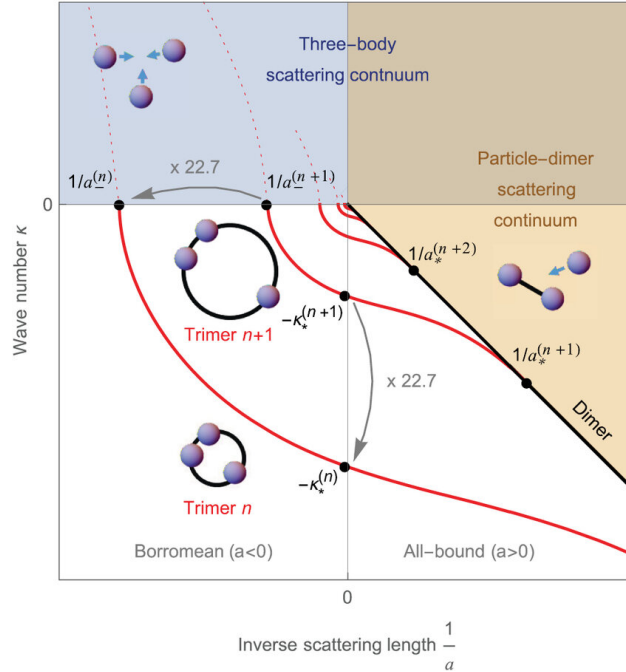
$$\kappa = \text{sign}(E) \sqrt{\frac{m|E|}{\hbar^2}}. \quad (1.8)$$

Elke trimer energie, en dus elk trimer golfgetal verschilt van een ander met de welbepaalde factor

$$\kappa_*^{(n+1)} = e^{-\pi/s_0} \kappa_*^{(n)} \approx \kappa_*^{(n)} / 22.7, \quad (1.9)$$

met $s_0 \approx 1.00624$ [2]. Voor contact potentialen, kan n elke arbitraire (oneindig grote) integer waarde hebben. Voor potentialen met een eindige reikwijdte bestaat er een grond toestand trimer, welke aangeduid wordt met $\kappa_*^{(0)}$ [44]. Hierdoor wordt het spectrum dus langs onder begrensd. In het rechtse gedeelte van de figuur wordt het gebied voorgesteld met positieve verstrooiingslengtes ($a > 0$), ofwel repulsieve interacties. In het gele gedeelte bevindt zich het continuüm gebied van het deeltje-dimer spectrum. Dit wordt afgebakend volgens een diagonale zwarte lijn, waarbij voor deze waarde van de verstrooiingslengte ook alle Efimov trimers zullen opbreken in een vrij deeltje en een dimer. Deze lijn stelt de dimer bindingsenergie voor. Voor grote waarden van de verstrooiingslengte kan deze benaderd worden door [44, 45]

$$E_{2b} = -\frac{\kappa^2 \hbar^2}{m} = -\frac{\hbar^2}{ma^2}. \quad (1.10)$$



Figuur 3: Schematische voorstelling van het Efimov spectrum. Hierbij wordt de inverse verstrooiingslengte geplot tegenover het golfgetal. De Efimov trimers worden gekarakteriseerd door de rode lijnen. De zwarte lijn stelt de twee-deeltjes bindingsenergie voor. Figuur overgenomen uit [6].

Later in sectie (5.4.1) van deze thesis zullen we laten zien hoe κ_* varieert als functie van de momentum cutoff Λ .

1.5 Outline

In deze thesis zal dus het doel zijn om het framework van de effectieve drie-deeltjes interacties te herformuleren met behulp van separabele potentialen. Dit zal stap voor stap opgebouwd worden, waarbij in elke stap een vergelijkende studie zal gemaakt worden met het EFT model met de contact interacties in ref. [2]. Hiertoe is deze thesis als volgens opgebouwd:

Hoofdstuk 2 biedt eerst een korte samenvatting/herhaling van verstrooiingstheorie, waarbij de gebruikte conventies en normalisaties worden getoond. Dit hoofdstuk is vooral gebaseerd op *Sakurai & Napolitano* [5] en *Taylor* [50]. Hierbij wordt besproken hoe tijdsevoluties kunnen gemaakt worden, de Lippmann-Schwinger vergelijking wordt aangehaald, en tot slot wordt de methode van de partiël golven toegelicht. In hoofdstuk 3 wordt het twee-deeltjes verstrooiingsprobleem uitgewerkt. Hierbij wordt uitgelegd hoe gewoonlijk in de literatuur met een contact interactie de twee-deeltjes verstrooiingsamplitude bepaald wordt. Nadien wordt dit herhaald voor separabele interacties en separabele T -matrices. Daarna wordt afgeleid hoe de verstrooiingslengte en effectieve dracht afhangen van de cutoff, en tot slot wordt het twee-kanalen model geïntroduceerd.

In hoofdstuk 4 wordt de stap gemaakt naar de drie-deeltjes interacties. Hierbij wordt de Lagrangiaan voorgesteld en herschreven tot een manier die makkelijk relateert aan een twee-kanalen proces. Hierna wordt overgestapt op veelkanalen verstrooiingen en wordt via de AGS-vergelijkingen afgeleid hoe de drie-deeltjes verstrooiingsamplitude kan bepaald worden. Hoofdstuk 5 is dan het hoofdstuk waar deze verstrooiingsamplitude effectief wordt berekend. Eerst en vooral wordt deze analytisch uitgewerkt en nadien vergeleken met het contact interactie model. Nadien zal dit ook numeriek geïmplementeerd worden. Tot slot biedt hoofdstuk 6 een samenvatting van alle belangrijke punten uit deze thesis en worden er suggesties gegeven voor onderzoeksvragen die voortbouwen op dit project.

2 De Basis van de Verstrooiingstheorie

Verstrooiingstheorie (of ‘scattering theory’) is een fundamentele theorie in de fysica die botsingsprocessen tussen deeltjes beschrijft. Hierbij wordt vertrokken van een bepaalde initiële toestand $|i\rangle$ welke, na interactie met een potentiaal, overgaat naar een nieuwe finale toestand $|n\rangle$ [5, 51]. Het doel van de verstrooiingstheorie is om de overgangswaarschijnlijkheden tussen deze toestanden te vinden en zo de fysische grootheden zoals de werkzame doorsnede, verstrooiingsamplitudes of de faseverschillen tussen de inkomende en uitgaande verstrooide golf te berekenen. Om dit theoretisch te formuleren wordt er verondersteld dat de totale Hamiltoniaan kan gesplitst worden in twee aparte delen,

$$H = H_0 + V(\mathbf{r}), \quad (2.1)$$

met hierbij $H_0 = \mathbf{p}^2/2m$ het vrije, niet-interagerende gedeelte van de Hamiltoniaan. Hierbij zijn p en m resp. de impuls en massa van een enkel deeltje. De term $V(\mathbf{r})$ stelt de interactiepotentiaal voor waaraan verstrooid wordt. De dynamica van het systeem wordt in het Schrödinger beeld beschreven door de tijdsafhankelijke Schrödinger vergelijking

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle. \quad (2.2)$$

Hieruit kan bepaald worden hoe een bepaalde kwantumtoestand in de tijd evolueert onder invloed van de Hamiltoniaan H . Wanneer de Hamiltoniaan niet expliciet afhangt van de tijd, zoals wij hier zullen veronderstellen, dan kan de algemene oplossing geschreven worden als

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\psi(0)\rangle = \exp\left(-i\hat{H}t/\hbar\right) |\psi(0)\rangle. \quad (2.3)$$

De operator $\hat{U}$ die in deze vergelijking voorkomt is een unitaire operator, en wordt de *tijdsevolutie operator* genoemd. Het feit dat deze operator unitair is heeft als resultaat dat elke begintoestand $|\psi(0)\rangle$ evolueert naar een unieke, nieuwe toestand $|\psi(t)\rangle$. De eigenvectoren van de vrije Hamiltoniaan kunnen getypeerd worden met momentum eigentoestanden $|\mathbf{p}\rangle$, gedefinieerd door

$$\hat{H}_0 |\mathbf{p}\rangle = E_p |\mathbf{p}\rangle = \frac{p^2}{2m} |\mathbf{p}\rangle. \quad (2.4)$$

Deze momentum toestanden vormen een continue, orthonormale basis met inproduct $\langle \mathbf{k}' | \mathbf{k} \rangle = \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k})$. De ruimtelijke golffuncties kunnen voorgesteld worden door vlakke golven

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}. \quad (2.5)$$

Hoewel het Schrödinger beeld een vaak gebruikte representatie vormt in de kwantummechanica, is het bij verstrooiingsprocessen vaak voordeliger om over te schakelen op het zogenaamde *interactie beeld* (ook wel het Dirac beeld genoemd). Hierbij worden zowel de operatoren als de toestanden tijdsafhankelijk. Meer specifiek worden in het interactiebeeld de evoluties van operatoren bepaald door de vrije Hamiltoniaan, terwijl de toestanden evolueren onder invloed van het interactie gedeelte. De relatie tussen het Schrödinger beeld en het interactie beeld wordt gegeven door

$$|\psi(t)\rangle_I = \exp\left(i\hat{H}_0 t/\hbar\right) |\psi(t)\rangle_S, \quad (2.6)$$

waarbij de subscripten I en S wijzen het op het gebruikte beeld. Hieruit volgt dan dat de tijdsevoluties van de toestanden in het interactiebeeld bepaald kunnen worden uit

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle_I = \hat{V}_I |\psi(t)\rangle_I. \quad (2.7)$$

Deze vergelijking stelt een soort van Schrödinger vergelijking voor, waarbij de uitdrukking voor V_I gegeven wordt door

$$\hat{V}_I = \exp\left(i\hat{H}_0 t/\hbar\right) \hat{V} \exp\left(-i\hat{H}_0 t/\hbar\right). \quad (2.8)$$

Om de toestand $|\psi\rangle$ op een later tijdstip t te bepalen van een begin tijdstip t_0 , kan de tijdsevolutie operator $\hat{U}$ in het interactie beeld laten ingewerkt worden op de initiële toestand zoals

$$|\psi, t_0; t\rangle_I = \hat{U}_I(t, t_0) |\psi, t_0; t_0\rangle_I. \quad (2.9)$$

Deze operator voldoet aan een integraalvergelijking die iteratief opgelost kan worden [5],

$$U_I(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_I(t') U_I(t', t_0) dt'. \quad (2.10)$$

De waarschijnlijkheid dat een initiële toestand $|i\rangle$ verstrooid wordt aan het verstrooiingscentrum, en nadien overgaat naar een nieuwe toestand $|n\rangle$, wordt dan gegeven door

$$\langle n|U_I(t, t_0)|i\rangle = \delta_{ni} - \frac{i}{\hbar} \sum_m \langle n|V|m\rangle \int_{t_0}^t e^{i(E_n - E_m)t'/\hbar} \langle m|U_I(t', t_0)|i\rangle dt', \quad (2.11)$$

met de normalisatievoorwaarde dat $\langle n|i\rangle = \delta_{ni}$. Formule (2.11) kan ook vereenvoudigd worden door de eerste orde benadering te maken op de tijdsevolutieoperator, zoals aangegeven in formule (2.10). Hierdoor wordt $\langle m|U_I(t', t_0)|i\rangle = \delta_{mi}$ en kan afgeleid worden dat

$$\langle n|U_I(t, t_0)|i\rangle = \delta_{ni} - \frac{i}{\hbar} \langle n|V|i\rangle \int_{t_0}^t e^{i(E_n - E_i)t'/\hbar} dt'. \quad (2.12)$$

Tot slot wordt ook vaak gewerkt met asymptotische toestanden, waarbij de limiet voor $t \rightarrow +\infty$ en $t_0 \rightarrow -\infty$ genomen wordt. Dit kan gedaan worden met behulp van de T -matrix (of transitie matrix),

$$\langle n|U_I(t, t_0)|i\rangle = \delta_{ni} - \frac{i}{\hbar} T_{ni} \int_{t_0}^t e^{i(E_n - E_i)t'/\hbar + \varepsilon t'} dt', \quad (2.13)$$

met T_{ni} de verkorte notatie van $\langle n|T|i\rangle$. Hierbij wordt verondersteld dat $\varepsilon > 0$ en dat t veel kleiner is dan $1/\varepsilon$, zodat de $e^{\varepsilon t'} \approx 1$ voor $t \rightarrow +\infty$ en $e^{\varepsilon t'} \approx 0$ voor $t_0 \rightarrow -\infty$. Hierbij wordt eerst de limiet voor $\varepsilon \rightarrow 0$ genomen, en nadien $t \rightarrow +\infty$. Deze limieten zijn van belang omdat ze de fysische interpretatie van inkomende en uitgaande toestanden mogelijk maken.

Om verstrooiingsprocessen te beschrijven wordt vaak gebruikt gemaakt van de S -matrix (de scattering matrix). Deze beschrijft namelijk het gehele verstrooiingsproces en het matrix element wordt gedefinieerd via

$$\begin{aligned} S_{ni} &= \lim_{t \rightarrow +\infty} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \langle n|U_I(t, t_0)|i\rangle = \delta_{ni} - \frac{i}{\hbar} T_{ni} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(E_n - E_i)t'/\hbar} dt' \\ &= \delta_{ni} - 2\pi i \delta(E_n - E_i) T_{ni}. \end{aligned} \quad (2.14)$$

In de eerste term van vergelijking (2.14) blijft de uitgaande toestand hetzelfde als de ingaande toestand, terwijl in de tweede term zich er een verstrooiingsevent voordoet dat beschreven wordt door de T -matrix. Deze transitiematrix is een zeer belangrijke grootte, aangezien deze ook de overgangssnelheid (of ‘transition rate’) $W_{i \rightarrow n}$ vastlegt, wat het aantal gedetecteerde deeltjes in een bepaalde toestand per tijdseenheid voorstelt. Deze transitie snelheid $W_{i \rightarrow n}$ geeft dus de snelheid aan waarmee een systeem in een initiële toestand $|i\rangle$ naar een finale toestand $|n\rangle$ overgaat door interactie met een verstrooiingspotentiaal. Deze kan bepaald worden via

$$W_{i \rightarrow n} = \frac{d}{dt} |\langle n | U_I(t, -\infty) | i \rangle|^2. \quad (2.15)$$

Eenmaal deze overgangssnelheid gekend is, kan de differentiële cross-sectie hiermee bepaald worden. Deze laatste beschrijft de kans dat een deeltje met momentum $\hbar \mathbf{k}$ verstrooid zal worden onder een bepaalde ruimtehoek $d\Omega$. De relatie tussen de transitie snelheid en de differentiële cross-sectie wordt gegeven door

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{j} \frac{dW}{d\Omega}, \quad (2.16)$$

met j het aantal inkomende deeltjes per tijdseenheid en per oppervlakte eenheid, en $d\Omega$ de grootte van de detector. De uiteindelijke relatie tussen de differentiële cross-sectie en de T -matrix kan na enkele tussenstappen bepaald worden, rekening houdend met de normalisatievoorwaarde van de toestanden, en wordt gegeven door

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \right)^2 |T_{ni}|^2. \quad (2.17)$$

Het kwadraat van de T -matrixelementen stelt hier dus intensiteit voor van de verstrooiing in een bepaalde richting. De T -matrix is dus een centrale grootte die in verband staat met de experimenteel meetbare grootheden zoals de differentiële cross-sectie en de verstrooiingsamplitude. Tot slot kan de totale cross-sectie dan bepaald worden via

$$\sigma_{tot} = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega. \quad (2.18)$$

Dit is een belangrijke grootte aangezien deze de waarschijnlijkheid beschrijft van het verstrooiingsproces.

2.1 Lippmann-Schwinger vergelijking

Voor een algemeen verstrooiingsproces waarbij een deeltje interageert met een bepaalde potentiaal werd de Hamiltoniaan gegeven door $H = H_0 + V(\mathbf{r})$, waarbij $H_0 = \mathbf{p}^2/(2m)$ de Hamiltoniaan van het vrije deeltje voorstelt, met eigenwaarden $E_{\mathbf{k}} = \hbar^2 \mathbf{k}^2/(2m)$. De Schrödinger vergelijking van dit systeem wordt dan gegeven door

$$(H_0 + V) |\psi\rangle = E |\psi\rangle. \quad (2.19)$$

Dit kan nog verder omgevormd worden tot

$$(E - H_0) |\psi\rangle = V |\psi\rangle. \quad (2.20)$$

De toestanden $|\psi\rangle$ vormen dus een set van basisfuncties voor de totale Hamiltoniaan H . De ongestoorde H_0 heeft een andere set eigentoestanden gegeven door $H_0 |i\rangle = E_i |i\rangle$. Dit laat ons toe om de Schrödinger vergelijking formeel op te lossen tot

$$|\psi\rangle = |i\rangle + \frac{1}{E_i - H_0} V |\psi\rangle. \quad (2.21)$$

Hierbij is ook de voorwaarde voldaan dat wanneer $V \rightarrow 0$, dan $|\psi\rangle \rightarrow |i\rangle$ en de Hamiltoniaan terug dezelfde eigentoestanden heeft als het ongestoorde systeem (vlakke golven). Opdat er geen divergenties zouden mogen voorkomen in de noemer van bovenstaande uitdrukking, wordt vaak nog een infinitesimale factor $i\hbar\varepsilon$ toegevoegd. Dit leidt dan tot de Lippmann-Schwinger vergelijking van de verstrooiingstheorie:

$$|\psi^{(\pm)}\rangle = |i\rangle + \frac{1}{E_i - H_0 \pm i\hbar\varepsilon} V |\psi^{(\pm)}\rangle. \quad (2.22)$$

We herkennen hier wederom de T -matrix die we al eerder hebben geïntroduceerd in de vorige sectie en die hier gedefinieerd kan worden als

$$T|i\rangle = V|\psi^{(+)}\rangle. \quad (2.23)$$

Dit volgt uit het feit dat de vectoren $|\psi^{(+)}\rangle$ zo gedefinieerd kunnen worden dat

$$T_{ni} = \sum_m \langle n|V|m\rangle \langle m|\psi^{(+)}\rangle = \langle n|V|\psi^{(+)}\rangle. \quad (2.24)$$

Om de operator vorm van de Lippmann-Schwinger vergelijking af te leiden laten we de operator V links ingewerken op vgl. (2.22). Door gebruik te maken van de definitie van de T -matrix als gegeven in vergelijking (2.23) vinden we dan

$$T = V + V \frac{1}{E_i - H_0 \pm i\hbar\varepsilon} T. \quad (2.25)$$

De operator $G_{0,\pm} = (E_i - H_0 \pm i\hbar\varepsilon)^{-1}$ wordt ook de vrije Greense functie G_0 genoemd. Meer specifiek is deze gedefinieerd via

$$G_{+0}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{\hbar^2}{2m} \left\langle \mathbf{r} \left| \frac{1}{E_i - H_0 + i\hbar\varepsilon} \right| \mathbf{r}' \right\rangle. \quad (2.26)$$

Met enkele bewerkingen kan verder aangetoond worden dat deze functie overeenstemt met de Greense functie van de Helmholtz vergelijking,

$$G_{+0}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{+ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}. \quad (2.27)$$

Het invoeren van de Greense functie laat toe om te werken met een iets compactere notatie voor de operator uitdrukking van de Lippmann-Schwinger vergelijking $T = V + VG_0T$. Deze reeks kan opnieuw ingevuld worden in zichzelf, wat leidt tot de Born expansie

$$T = V + VG_0V + VG_0VG_0V + \dots. \quad (2.28)$$

Uit de Lippmann-Schwinger vergelijking kan verder ook een uitdrukking afgeleid worden voor de golffunctie op positie $\mathbf{r}$. Wanneer verondersteld wordt dat de golffunctie gemeten wordt ver buiten het bereik van de potentiaal, en de Helmholtz Greense functie ingevuld wordt, dan kan aangetoond worden met behulp van vgl. (2.22) dat de golffunctie gegeven wordt door

$$\langle \mathbf{r}|\psi^{(+)}\rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left(e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \right). \quad (2.29)$$

Deze uitdrukking bestaat uit twee delen met elk een fysische interpretatie. De eerste term stelt de initiële vlakke golf voor met golfgetal k , terwijl de tweede term een uitgaande sferische golf voorstelt

met k' het golfgetal van de verstrooide golf. De factor $f(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ wordt de verstrooiingsamplitude genoemd en hangt af van de potentiaal via

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle \mathbf{k}' | V | \psi^{(+)} \rangle. \quad (2.30)$$

De verstrooiingsamplitude staat ook in direct verband met de differentiële cross-sectie via

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2. \quad (2.31)$$

Om een makkelijke uitdrukking voor de verstrooiingsamplitude te vinden wordt regelmatig gebruik gemaakt van de Born benadering. Herinner dat de Born expansie werd gegeven door (2.28). Tot op eerste orde in de interactie V vertelt deze dat $T \approx V$. Hieruit volgt verder dat $V|i\rangle \approx T|i\rangle$ in de limiet van zwakke wisselwerking, en met behulp van de definitie van de T -matrix volgt hieruit dat in deze limiet geldt dat $T|i\rangle = V|\psi^{(+)}\rangle \Rightarrow |\psi^{(+)}\rangle \approx |i\rangle = |k\rangle$. De eerste orde uitdrukking voor de verstrooiingsamplitude wordt hiermee

$$f^{(1)}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \approx -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \int V(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r}. \quad (2.32)$$

Het valt op dat $f^{(1)}$ enkel afhangt van $\mathbf{q} = (\mathbf{k} - \mathbf{k}')$. Wanneer er verder gewerkt wordt met een sferisch symmetrische potentiaal, dan hangt de verstrooiing alleen af van de hoek θ tussen $\mathbf{k}$ en $\mathbf{k}'$. Verder kunnen ook nog twee limiet gevallen bekeken worden. Wanneer de potentiaal een bereik heeft van lengte R , dan kan in de lage-energie limiet, $kR \ll 1$, de exponentiële macht $\exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \approx 1$ gesteld worden. Zo bekomt men een uitdrukking voor $f^{(1)}(\mathbf{q})$ met een drie-dimensionale integraal die niet meer van q afhangt. Anderzijds in de hoge-energie limiet, met $kR \gg 1$, zal de exponentiële macht een grote bijdrage geven en zal het integrandum grote oscillaties vertonen, waardoor $f^{(1)}(\theta)$ zeer klein zal worden.

2.2 Methode van de partiële golven

Een alternatieve manier om een verstrooiingsprobleem met een sferisch symmetrische potentiaal op te lossen, in plaats van te werken met de Born benadering welke alleen accuraat zal zijn in de limiet van zwakke wisselwerkingen, is de methode van de partiële golven. Hierbij kunnen de golf functies en de verstrooiingsamplitude uitgedrukt worden als een som van partiële golven, waarbij elke golf een verschillend angulair momentum kwantumgetal l heeft. De inkomende vlakke golf kan bijvoorbeeld op deze manier ontbonden worden in partiële golven,

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) P_l(\cos\theta) j_l(kr). \quad (2.33)$$

De hoek θ is de hoek die het verstrooide deeltje maakt t.o.v. het inkomende deeltje. $P_l(\cos\theta)$ is een Legendre polynoom en $j_l(kr)$ is een sferische Bessel functie. Voor de verstrooiingsamplitude kan ook een ontwikkeling gemaakt worden in deze basis volgens

$$f_k(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos\theta) f_l(k), \quad (2.34)$$

waarbij de factoren $f_l(k)$ een discrete set van complexe getallen vormen. Deze coëfficiënten hangen ook samen met een (reële) fase δ_l via

$$f_l(k) = \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2ik} = \frac{1}{k} e^{i\delta_l} \sin \delta_l = \frac{1}{k \cot \delta_l - ik}, \quad (2.35)$$

waardoor de verstrooiingsamplitude daarmee gegeven wordt door

$$f_k(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) e^{i\delta_l} \sin \delta_l. \quad (2.36)$$

De fase δ_l geeft de faseverschuiving aan van de verstrooide golf t.o.v. de ongestoorde vrije golf. Het teken van de fase geeft voor zwakke wisselwerkingen aan of de interactie uiteindelijk aantrekkelijk of repulsief is. In sectie (2.3) zal dit door middel van een voorbeeld meer duidelijk worden. Ook kan nu de totale cross-sectie, welke eerder werd gedefinieerd werd in vergelijkingen (2.16) tot (2.18), bepaald worden als functie van deze fasen via

$$\begin{aligned} \sigma_{tot} &= \int |f_k(\theta)|^2 d\Omega \\ &= \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \sin^2 \delta_l. \end{aligned} \quad (2.37)$$

Wanneer deze fasen dus gekend zijn, dan ligt de verstrooiingsamplitude ook vast en kan de oplossing van het probleem volledig beschreven worden. Om een uitdrukking voor de fasen te vinden kan een sferisch symmetrische potentiaal met straal R beschouwd worden als voorbeeld. Hiervoor kunnen twee verschillende regio's onderscheiden worden. Als eerste regio A , waarbij $V(r) = 0$ voor $r > R$, en als tweede regio B , waarbij $V(r) \neq 0$ voor $r < R$. De sferische symmetrie van de interactie potentiaal impliceert dat alleen het radiële gedeelte van de golffunctie aangetast zal zijn door de potentiaal. Dit inspireert de volgende ontbinding van de totale golffunctie in een hoek-afhankelijk aan een radiaal gedeelte,

$$\psi(r, \theta, \phi) = \sum_{l,m} R_l(r) Y_l^m(\theta, \phi). \quad (2.38)$$

Hierbij stellen $Y_l^m(\theta, \phi)$ de sferische harmonieken voor, waarvoor geldt dat

$$Y_l^m(\theta, \phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi}, \quad (2.39)$$

met $m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$, en $P_l^m(\cos \theta)$ de geassocieerde Legendre polynomen. De radiële component van de golffunctie $R_l(r)$ moet voldoen aan de radiale Schrödinger vergelijking,

$$\begin{aligned} &\left[-\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r) \right] R_l(r) = E R_l(r) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} R_l(r) \\ \Rightarrow &\left[-\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2mV(r)}{\hbar^2} \right] R_l(r) = 0. \end{aligned} \quad (2.40)$$

In regio A is de potentiaal gelijk aan nul en kan een algemene oplossing voorgesteld worden: $A_l(r) = c_1 h_l^+(kr) + c_2 h_l^-(kr)$. De oplossing bevat de sferische Hankel functies $h_l^\pm = j_l \pm i n_l$, met n_l de sferische Neumann functie. Voor $r \rightarrow \infty$, moet deze oplossing matchen aan

$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) \frac{1}{2ik} \left(\frac{e^{ikr}}{r} e^{2i\delta_l} - \frac{e^{-i(kr-l\pi)}}{r} \right). \quad (2.41)$$

Zonder de fase verschuiving δ_l komt vergelijking (2.41) overeen met een vrij propagerende vlakke golf, hier ontbonden in termen van een uitgaande (eerste term) en inkomende (tweede term) sferische

golf. Het totale effect van de verstrooiing in het asymptotische regime wordt dan gegeven door de toevoeging van de faseverschuiving bovenop de uitgaande bolgolf. De limiet van de sferische Hankel functies is gekend voor $x \rightarrow \infty$, namelijk $h^\pm(x) \rightarrow \frac{1}{x} e^{\pm ix} e^{\mp i\pi \frac{l+1}{2}}$. Door deze limieten gelijk te stellen aan elkaar kunnen de coëfficiënten c_1 en c_2 bepaald worden. De algemene oplossing wordt dan uitgeschreven als functie van de fasen,

$$\begin{aligned} A_l(r) &= \frac{1}{2} e^{2i\delta_l} h_l^+(kr) + \frac{1}{2} h_l^-(kr) \\ &= e^{i\delta_l} [j_l(kr) \cos \delta_l - n_l(kr) \sin \delta_l]. \end{aligned} \quad (2.42)$$

Voor regio B kan ook een oplossing bepaald worden voor het verstrooiingsproces. $B_l(r)$ kan bepaald worden uit de radiale Schrödinger vergelijking, waarbij het belangrijk is dat $B_l(0)$ een eindige waarde geeft. Hiervoor introduceren we een nieuwe functie u waarvoor geldt dat $u_l(r) := rB_l(r)$ en $u_l(0) = 0$ en $\frac{du_l(r)}{dr}|_{r=0}$ arbitrair. Tot slot moeten ook de randvoorwaarden voldaan zijn waarbij de golf functies, en de afgeleiden continu zijn op $r = R$. Deze beide vergelijkingen zijn voldaan als er gewerkt wordt met logaritmische afgeleiden volgens

$$\begin{aligned} \left(\frac{r}{A_l(r)} \frac{dA_l(r)}{dr} \right) \Big|_{r=R} &= \left(\frac{r}{B_l(r)} \frac{dB_l(r)}{dr} \right) \Big|_{r=R} \\ &\Rightarrow \beta_l^{uit} = \beta_l^{in}. \end{aligned} \quad (2.43)$$

Omdat al eerder een oplossing voor A_l bepaald werd kan hieruit een uitdrukking voor δ_l gezocht worden,

$$\begin{aligned} \beta_l^{uit} &= \frac{kR (\cos \delta_l j'_l(kR) - \sin \delta_l n'_l(kR))}{\cos \delta_l j_l(kR) - \sin \delta_l n_l(kR)} \\ &\Rightarrow \tan \delta_l = \frac{kR j'_l(kR) - \beta_l^{uit} j_l(kR)}{kR n'_l(kR) - \beta_l^{uit} n_l(kR)}. \end{aligned} \quad (2.44)$$

Deze formule toont aan hoe faseverschuiving δ_l afhankelijk is van de asymptotische afgeleiden β_l en de range R . Eenmaal deze laatsten gekend zijn, kunnen hiermee dan ook fysische grootheden zoals de cross-sectie bepaald worden. In de komende sectie zal deze werkwijze met de partiële golven uitgewerkt worden voor een specifiek voorbeeld, namelijk dat van de harde sfeer verstrooiing.

2.3 Harde sfeer verstrooiing

Voor het scattering probleem aan een harde bol kan de volgende potentiaal gebruikt worden:

$$V(r) \begin{cases} +\infty, & r < R \\ 0, & r > R. \end{cases} \quad (2.45)$$

Aangezien de potentiaal oneindig sterk is binnen de bol, en hierdoor de golf functie op geen enkele manier kan binnendringen, zal $B_l(r)$ gelijk zijn aan nul, zoals eerder gedefinieerd in sectie (2.2). De vorm van $A_l(r)$ werd in de vorige sectie al besproken, en blijft hier ook hetzelfde. De fase δ_l kan bepaald worden uit de randvoorwaarde dat $A_l(R) = B_l(R)$, wat leidt tot

$$A_l(R) = 0 = e^{i\delta_l} (j_l(kR) \cos \delta_l - n_l(kR) \sin \delta_l). \quad (2.46)$$

Hieruit volgt dan dat $\tan \delta_l = j_l(kR)/n_l(kR)$. Vervolgens kan dit probleem onderzocht worden voor verschillende waarde van l . Wanneer $l = 0$ wordt gekozen, dan wordt dit s -golf verstrooiing genoemd

($l = 1 \rightarrow p$ -golf, $l = 2 \rightarrow d$ -golf). Hier en verder in deze thesis zullen steeds s -golf verstrooiingen worden gebruikt, aangezien dit de dominante bijdrage is voor ultrakoude bosonische gassen. Dus wanneer hiermee verder wordt gewerkt, dan kan de fase bepaald worden met de uitdrukkingen voor de sferische Bessel en Neumann functies: $j_0(kR) = \sin(kR)/(kR)$ en $n_0(kR) = -\cos(kR)/(kR)$. Hierdoor kan de fase berekend worden met de simpele uitdrukking

$$\tan \delta_0 = \frac{j_0(kR)}{n_0(kR)} = \frac{\sin(kR)}{-\cos(kR)} = -\tan(kR). \quad (2.47)$$

Uit deze vergelijking volgt verder dat $\delta_0 = -kR$. Dit kan verder ingevuld worden in de radiale oplossing binnenin de bol,

$$\begin{aligned} A_0(r) &= \frac{1}{kr} e^{-ikR} (\sin(kr) \cos \delta_0 + \cos(kr) \sin \delta_0) \\ &= \frac{1}{kr} e^{-ikR} \sin(kr + \delta_0) = \frac{1}{kr} e^{-ikR} \sin(k(r - R)). \end{aligned} \quad (2.48)$$

Deze golffunctie staat visueel voorgesteld in figuur 4. De streepjeslijn stelt hierbij de golffunctie voor wanneer er geen potentiaal zou zijn. De volle zwarte lijn stelt de golffunctie voor die verstrooid wordt aan een harde sfeer. Deze heeft dus een sinusoidale vorm en is verschoven op de positie R .

Tot slot kan de lage-energie limiet hier ook nog interessant zijn om te bekijken, aangezien in de latere secties ook altijd naar dit regime zal worden gekeken. Hiervoor geldt dat $kR \ll 1$. Het gedrag van de sferische Bessel en Neumann functies $j_l(x)$ en $n_l(x)$ voor $x \rightarrow 0$ zijn gekend uit de literatuur [52] en laten ons toe om de fasehoek opnieuw te berekenen,

$$\tan \delta_l = \frac{\frac{(kR)^l}{(2l+1)!!}}{-\frac{(2l-1)!!}{(kR)^{l+1}}} = \frac{-(kR)^{2l+1}}{(2l+1)!!(2l-1)!!} \propto -(kR)^{2l+1}. \quad (2.49)$$

Aangezien in de lage-energie limiet gewerkt wordt, en daarmee kR dus heel klein wordt, is het toegestaan om de tangens functie te benaderen door zijn eerste orde Taylor expansie. Dit bevestigt nogmaals ons eerder statement dat s -golf scattering vaak dominant is in ultrakoude gassen. We zien hier immers dat verstrooiing met hogere partiële golven onderdrukt wordt met factoren $(kR)^{2l+1}$.

Om af te sluiten kan ook de totale cross-sectie nog berekend worden voor $l = 0$:

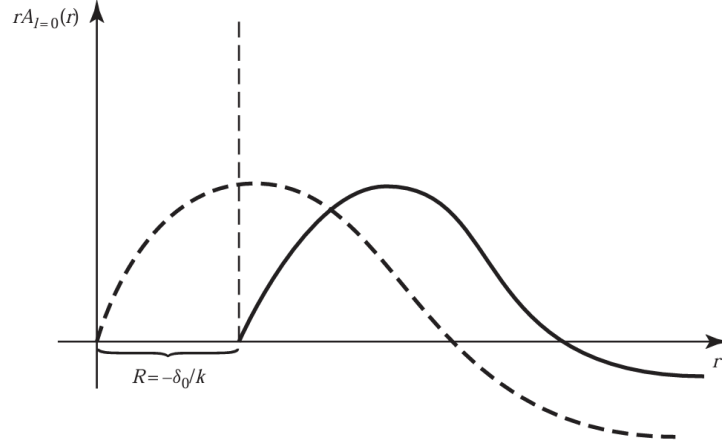
$$\sigma_{tot} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \sin^2 \delta_l \approx \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0. \quad (2.50)$$

Hier werd alleen de nulde orde overgehouden uit de sommatie omdat deze de grootste bijdrage zal leveren. De sinus kan ook benaderd worden en de fase δ_0 kan vervangen worden door het resultaat uit vgl. (2.49), zodat

$$\sigma_{tot} \approx \frac{4\pi}{k^2} (-kR)^2 = 4\pi R^2. \quad (2.51)$$

2.4 Samenvatting van lage-energie verstrooiing

De methode van de partiële golven is in het algemeen bruikbaar voor sferisch symmetrische potentialen en werkt het beste in de lage-energie range, waarbij de sommatie over het angulaire momentum l kan worden afgebroken. Op basis van de theorie besproken in de vorige twee secties, kunnen we nu een volgend algemeen voorschrift voor de analyse van lage-energie verstrooiing definiëren:



Figuur 4: Voorstelling van de golffunctie uit vgl. (2.48) (de volle lijn) en een golffunctie waarvoor de potentiaal nul zou zijn (streepjes lijn). De volle lijn heeft dus een faseverschuiving gekregen $\delta_0 = -kR$ t.o.v. de streepjeslijn. Figuur overgenomen uit [5].

1. Verdeel de ruimte in een binnenste regio ($r < R$) waar $V(r) \neq 0$, en een buitenste regio ($r > R$) waar $V(r) = 0$.
2. Los de radiale Schrödinger vergelijking op voor $u_l(r) = rB_l(r)$:

$$\frac{d^2 u_l}{dr^2} + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2mV(r)}{\hbar^2} \right] u_l(r) = 0, \quad (2.52)$$

met $u_l(0) = 0$ en $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$.

3. Bepaal de logaritmische afgeleiden op het randpunt $r = R$:

$$\beta_l = \left(\frac{r}{B_l(r)} \frac{dB_l(r)}{dr} \right) \Big|_{r=R}. \quad (2.53)$$

4. Bereken de fase verschuivingen via

$$\tan \delta_l = \frac{kR j'_l(kR) - \beta_l j_l(kR)}{kR n'_l(kR) - \beta_l n_l(kR)}. \quad (2.54)$$

5. Bereken de verstrooiingsamplitude

$$f_k(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) e^{i\delta_l} \sin \delta_l. \quad (2.55)$$

6. Tot slot kan de totale cross-sectie bepaald worden met de uitdrukking van de verstrooiingsamplitude via $\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_k(\theta)|^2$ en $\sigma_{tot} = \int |f_k(\theta)|^2 d\Omega$.

Voor s -golf interacties (waarbij enkel $l = 0$ wordt beschouwd) kan tot slot ook nog de verstrooiingslengte a geïntroduceerd worden. Deze is gedefinieerd volgens

$$a = - \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\tan \delta_0}{k}. \quad (2.56)$$

De gehele expansie tot op orde k^2 wordt voor deze interacties wordt gegeven door gegeven door:

$$\lim_{k \rightarrow 0} k \cot \delta_0 \approx -\frac{1}{a} + \frac{1}{2} R_{\text{eff}} k^2 + \dots, \quad (2.57)$$

waarbij R_{eff} de effectieve range voorstelt. Vergelijking (2.56) laat effectief zien hoe de s -golf verstrooiingslengte a de ‘zero-energy’ limiet voor het verstrooiingslimiet voorstelt. Wanneer a positief en groot wordt, dan zal dit overeenkomen met een repulsieve potentiaal. Echter wanneer a klein of negatief wordt, dan zal de potentiaal aantrekkend zijn. De totale cross-sectie kan ook in functie geschreven worden van de verstrooiingslengte door gebruik te maken van

$$\sigma_{\text{tot}} = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0. \quad (2.58)$$

Voor de lage-energie limiet wordt de faseverschuiving ook klein, en kan de sinus benaderd worden door $\sin \delta_0 \approx \delta_0 \approx -ka$. Zo wordt deze simpele uitdrukking voor de cross-sectie bekomen

$$\sigma_{\text{tot}} = 4\pi a^2. \quad (2.59)$$

3 Het Twee-Deeltjes Probleem

In dit hoofdstuk zal het verstrooiingsproces tussen twee deeltjes in meer detail bekeken worden. Dit vormt een goede tussenstap naar het uiteindelijke drie-deeltjes probleem wat in hoofdstukken 4 en 5 bestudeerd zal worden. Meer specifiek zal hier gekeken worden naar de interactie tussen twee identieke bosonen, elk met gelijke massa $m_1 = m_2 = m$. De Hamiltoniaan voor dit systeem wordt gegeven door

$$H = H_0 + V. \quad (3.1)$$

Echter wordt het vrije gedeelte nu opgesplitst in de bijdrage van de ééndeeltjes vrije Hamiltonianen $H_0^{(i)}$ van elk deeltje apart, plus een bepaalde interatomaire potentiaal $V(\mathbf{r})$

$$H = H_0^{(1)} + H_0^{(2)} + V(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m} + V(\mathbf{r}). \quad (3.2)$$

De afstand tussen de deeltjes wordt dus gegeven door $\mathbf{r}$. Wanneer de interatomaire potentiaal enkel afhangt van de relatieve afstand tussen de deeltjes, zoals wij hier zullen beschouwen, is het handig om een relatief coördinaten systeem te gebruiken. Hiervoor kan een massacentrum van de twee deeltjes bepaald worden, en kunnen dus alle grootheden bepaald worden ten opzichte van dit massacentrum. Hierbij kunnen we dan het twee-deeltjes probleem beschouwen als de interactie van een enkel deeltje met een externe potentiaal, waarbij dit deeltje een *gereduceerde* massa μ heeft, gedefinieerd als:

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}. \quad (3.3)$$

Merk op dat in ons geval waarbij de twee deeltjes eenzelfde massa bezitten, de gereduceerde massa hier gelijk wordt aan $\mu = m/2$.

Het verdere doel van dit hoofdstuk is om nu een systematische vergelijking te maken tussen scattering tussen twee deeltjes waarbij de interactie tussen de deeltjes als contact versie beschouwd wordt [2], en het geval waarbij een separabele potentiaal gebruikt wordt. Een centrale grootheid die het gehele verstrooiingsproces beschrijft, is de totale Greense functie $G(\mathbf{k}, t)$. Greense functies beschrijven de kwantummechanische amplitude voor een deeltje om te starten in een momentum toestand $\mathbf{k}$ op $t = 0$, en nadien op tijdstip t ook terug te eindigen in toestand $\mathbf{k}$ [29, 53, 54]. In een meer kwantumveldentheorie-context kan de Greense functie ook geïnterpreteerd worden als de beschrijving van de voortplanting van een excitatie in ruimtetijd. Daarom wordt deze ook wel een propagator genoemd. Deze kan berekend worden door de tijdsgeordende verwachtingswaarde uit te rekenen van de veldoperatoren,

$$G(\mathbf{k}, t) = \left\langle \mathcal{T} \psi_{\mathbf{k}}(t) \psi_{\mathbf{k}}^\dagger(0) \right\rangle, \quad (3.4)$$

met hierbij $\mathcal{T}$ de tijdsordening operator. Deze Greense functies zijn van groot belang aangezien later hiermee expansies in Feynman diagrammen gemaakt kunnen worden, en de verstrooiingsamplitudes rechtstreeks afhangen van deze Greense functies. In de komende twee subsecties zullen nu twee verschillende manieren worden vertoond waarop het twee-deeltjes systeem en de bijhorende Greense functies benaderd kunnen worden.

3.1 De contact interactie

Vaak wanneer een effectieve veldentheorie wordt opgesteld voor interagerende veeldeeltjessystemen, wordt er verondersteld dat de deeltjes interageren via een contact interactie [2]. Dit wilt zeggen dat

de deeltjes elkaar enkel zullen voelen wanneer deze zich exact bovenop elkaar bevinden. In meer wiskundige taal vertaalt zich dit tot een delta potentiaal, $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = g_2 \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)/4$, waarbij g_2 de twee-deeltjes interactiesterkte voorstelt. In deze thesis willen we graag een andere aanpak volgen, en de contact interactie vervangen door een separabale vorm. In deze subsectie zal kort samengevat worden hoe voor de contact interactie de Greense functie bepaald kan worden via een perturbatieve expansie, welke vooral gebaseerd is op de aanpak zoals gepresenteerd door E. Braaten en H.-W. Hammer in ref. [2]. Hiermee kan in de hierop volgende subsecties een kwantitatieve vergelijking gemaakt worden met de separabele interacties.

In de kwantumveldentheorie (afgekort QFT) wordt frequenter gewerkt met het Lagrangiaanse formalisme in plaats van het Hamiltoniaans formalisme. Dit eerste heeft bijvoorbeeld het voordeel dat symmetrieën makkelijker in de beschrijving verwerkt kunnen worden. Vanuit de Lagrangiaan kan overigens de actie functionaal bepaald worden welke het systeem zal beschrijven, bijvoorbeeld via de Euler-Lagrange bewegingsvergelijkingen of via het padintegraal formalisme [28, 30]. De Lagrangiaan dichtheid die veeldeeltjessystemen met twee-deeltjes contact interacties beschrijft wordt geformuleerd als

$$\mathcal{L} = \psi^\dagger \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \right) \psi - \frac{g_2}{4} (\psi^\dagger \psi)^2. \quad (3.5)$$

Merk op dat we in dit verslag werken met units $\hbar = 1$ en $\mu = 1$. Met behulp van de gedefinieerde Lagrangiaan kunnen we nu het verband tussen de Greense functie en de Feynman diagrammen beter uitwerken. Dit verband komt voort uit het feit dat de diagrammen voorkomen uit de schematische voorstelling van de ontbinding van de Greense functies in een perturbatieve ontwikkeling in termen van het aantal scattering processen tussen deeltjes [29]. Elke lijn in een Feynman diagram stelt een vrije Greense functie/propagator voor, en de vertices kunnen bepaald worden uit de interactie term(en) in de Lagrangiaan. De Greense functie voor de propagatie van een paar van deeltjes wordt gegeven door

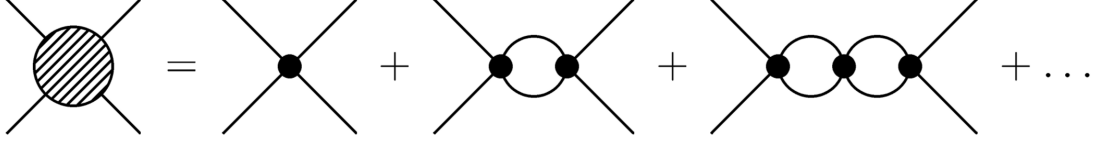
$$G = \langle \mathcal{T}(\psi\psi\psi^\dagger\psi^\dagger) \rangle \quad (3.6)$$

De fysieke informatie voor twee-deeltjes scattering zit bevat in het afgebroken en geconnecteerde gedeelte van de bovenstaande Greense functie (= ‘truncated connected Green’s function’), hetgeen kan worden verkregen door van vgl. (3.6) de volgende term af te splitsen:

$$\langle \mathcal{T}(\psi\psi^\dagger) \rangle \langle \mathcal{T}(\psi\psi^\dagger) \rangle. \quad (3.7)$$

Het doel van deze subsectie zal zijn om de vier-punts afgebroken geconnecteerde Greense functie te bepalen. In de context van diagrammatica wilt dit zeggen dat alleen de geconnecteerde Feynman diagrammen worden overgehouden waarbij de start en eind propagatoren worden genegeerd. De Fouriergetransformeerde versie van de resulterende geconnecteerde vier-punts Greense functie komt overeen met de *verstrooiingsamplitude* $i\mathcal{A}$. Uit deze belangrijke grootheid kan de verstrooiingslengte a berekend worden via $a = -\frac{1}{8\pi}\mathcal{A}(0)$ in dit formalisme. Later bij de separabele potentiaal zal de verstrooiingsamplitude ook berekend en vergeleken worden met de waarde van dit model.

De waarde van de vrije propagator iG_0 en de vertex factoren kunnen afgelezen worden uit de Lagrangiaan hierboven. De vrije propagator wordt gegeven door $iG_0 = i/(p_0 - \mathbf{p}^2/2 + i\varepsilon)$, en de vertex factor wordt gelijk aan $-ig_2$. Hierbij werd gewerkt in 4-vector notatie, waarbij $p = (p_0, \mathbf{p})$. De Greense functie $i\mathcal{A}$ kan nu ontwikkeld worden in diagrammen, wat afgebeeld wordt in figuur 5. Om nu deze reeks op te schrijven in formule vorm, moet gebruik gemaakt worden van de *Feynman regels*. Voor elke propagator die in het diagram voorkomt, buiten de start en eind lijnen,



Figuur 5: Dyson reeks van de totale Greense functie uitgeschreven in perturbatieve vorm. Afbelding overgenomen uit bron [2].

moet een vrije propagator neergeschreven worden. Voor elke vertex komt er een extra factor $-ig_2$ bij. In elke vertex moet er behoud van energie en impuls gelden. In elke lus ('loop') moet er geïntegreerd worden over het vrij te kiezen 4-momentum. Tot slot moet er rekening gehouden worden met symmetrie factoren gerelateerd aan de aanwezigheid van identieke lijnen verbonden aan vertices en gerelateerd aan de aanwezigheid van identieke vertices. Deze factoren kunnen verkregen worden door alle mogelijkheden te tellen hoe je de vertices kan verbinden zodat het diagram wordt bekomen [19].

Nu kunnen de diagrammen in figuur 5 neergeschreven worden in formule vorm. Hiervoor wordt beschouwd dat twee inkomende deeltjes met momentum $+k$ en $-k$ verstrooien en uiteengaan als deeltjes met momentum k' en $-k'$. Gebruikmakend van de hierboven geformuleerde Feynman regels kan aangetoond worden dat de verstrooiingsamplitude welke volgt uit de diagrammen gegeven wordt door (tot op $\mathcal{O}(g_2^2)$, wat dus overeenkomt met alleen de eerste twee diagrammen)

$$\mathcal{A}(E) \approx -g_2 - \frac{ig_2^2}{2} \int \frac{d^4q}{(2\pi)^4} \frac{1}{q_0 - \mathbf{q}^2/2 + i\varepsilon} \frac{1}{E - q_0 - \mathbf{q}^2/2 + i\varepsilon} + \mathcal{O}(g_2^3). \quad (3.8)$$

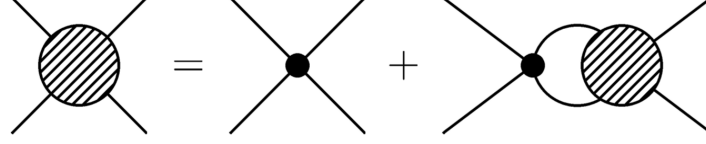
Hierbij hangt deze uitdrukking enkel nog af van de energie E aangezien in het massacentrum het totale impuls gelijk wordt aan nul. De integraal over de energie, $\int dq_0$, kan uitgevoerd worden met contour integratie waardoor de amplitude verder vereenvoudigt tot

$$\mathcal{A}(E) \approx -g_2 - \frac{g_2^2}{2} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{1}{E - \mathbf{q}^2/2 + i\varepsilon} + \dots \quad (3.9)$$

Echter is deze formulering problematisch sinds deze integraal divergeert voor grote momenta q . Dit is een gevolg van het gebruik van de contact interactie aangezien deze geen intrinsieke interactie range introduceert in het scattering probleem. Dit soort divergenties in integralen wordt ook wel ultra-violet divergenties genoemd. Om dit soort divergenties te behandelen wordt overgestapt op een *regularisatie en renormalisatie* proces. Zoals eerder besproken in de introductie en kort herhaald hier, is de eerste stap van dit proces regularisatie, waarbij de integraal wordt afgebroken vanaf een bepaald momentum. Waar dus momenteel nog de bovengrens op $+\infty$ staat op de momentum integraal in vgl. (3.9), wordt deze nu veranderd naar een eindige waarde. Deze maximale impuls wordt dan de *cutoff* Λ genoemd. Het idee hierachter is dat de impulsen groter dan Λ geen bijdrage hebben aan een laag-energetisch model [30–33]. De bovenstaande integraal kan geschreven worden met cutoff als

$$\mathcal{A}(E) \approx -g_2 - \frac{g_2^2}{2} \int_{|\mathbf{k}| < \Lambda} \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{1}{E - \mathbf{q}^2/2 + i\varepsilon} + \dots \quad (3.10)$$

Zolang deze parameter Λ niet oneindig groot wordt, dan zal deze integraal dus ook niet divergeren. Merk op dat Λ dus geen fysische grootte is, enkel een arbitraire grens op een anders divergerende integraal. De tweede stap die nu gemaakt moet worden is de renormalisatie. Wanneer de integraal in



Figuur 6: Dyson reeks van de totale Greense functie voorgesteld als integraal vergelijking. Afbeelding overgenomen uit bron [2].

vgl. (3.10) nu opgelost zou worden, dan zou de verstrooiingsamplitude afhangen van de niet-fysische parameter Λ , wat niet gewenst is. Renormalisatie zorgt ervoor dat je een bepaalde parameter ‘opoffert’ en deze aanpast als functie van de cutoff. Dit heeft als doel dat de gerenormaliseerde parameter de afhankelijkheid van fysische grootheden aan Λ compenseert, en daarmee zorgt voor een effectieve theorie waarbij observabelen onafhankelijk zijn van de gekozen waarde van de cutoff Λ .

Wanneer de renormalisatie hier wordt doorgevoerd, dan kan de verstrooiingslengte bepaald worden (via $a = -\frac{1}{8\pi}\mathcal{A}(0)$)

$$a \approx \frac{g_2}{8\pi} \left(1 - \frac{g_2\Lambda}{4\pi^2} + \dots \right), \quad (3.11)$$

zodat tot op tweede orde in a

$$g_2 = 8\pi a \left(1 + \frac{2a\Lambda}{\pi} + \dots \right). \quad (3.12)$$

De bovenstaande vergelijking vertelt dus hoe de koppingsconstante g_2 moet veranderen als functie van de cutoff Λ opdat toch nog de juiste waarde voor a wordt gevonden. Door dit schema te volgen wordt dus de verstrooiingsamplitude uiteindelijk weer onafhankelijk van Λ .

Zowel de verstrooiingslengte als de interactiesterkte zijn nu bepaald uit de perturbatieve expansie van de Feynman diagrammen. Echter kan dit meer algemeen ook bepaald worden als een integraalvergelijking. In figuur 5 is te zien dat de laagste orde diagrammen te herkennen zijn in de hogere orde diagrammen. Dit kan dan voorgesteld worden zoals in figuur 6, de diagrammatische voorstelling van een zgn. Dysonvergelijking. Zoals weergegeven in dit figuur en door gebruik te maken van de hierboven gedefiniëerde Feynman regels kan de uitdrukking voor de verstrooiingsamplitude na de Dyson-hersommatie van de perturbatiereeks in de interactie g_2 geschreven worden als

$$\mathcal{A}(E) \approx -g_2 - \frac{ig_2^2}{2} \int \frac{d^4q}{(2\pi)^4} \frac{1}{q_0 - \mathbf{q}^2/2 + i\varepsilon} \frac{1}{E - q_0 - \mathbf{q}^2/2 + i\varepsilon} \mathcal{A}(E). \quad (3.13)$$

Dit kan opnieuw uitgewerkt worden via hetzelfde regularisatie en renormalisatie schema van hierboven. Echter, in plaats van een perturbatieve approximatie, kan er nu een exacte uitdrukking voor de verstrooiingslengte bepaald worden, die in principe geldig is voor arbitraire interactiesterkten, namelijk

$$a = \frac{g_2}{8\pi} \left(\frac{1}{1 + g_2\Lambda/(4\pi^2)} \right). \quad (3.14)$$

3.2 Separabele interacties

De contact interacties typisch gebruikt in EFTs houden geen rekening met het feit dat atomen elkaar ook kunnen beïnvloeden wanneer ze zich niet *exact* op dezelfde positie bevinden. Zoals besproken in sectie (1.2) kunnen separabele potentialen een eenvoudig alternatief bieden aan contact

potentials. In tegenstelling tot contact potentials, introduceren separabele potentials een intrinsieke lengteschaal waarover interagerende deeltjes wisselwerken. Om een vergelijking te kunnen maken tussen een zeer eenvoudige separabele potentiaal; namelijk een separabele potentiaal met stapfunctie vormfactoren in de Fourier ruimte, en de contact interactie uit [2], kan opnieuw de verstrooiingsamplitude uitgerekend worden, maar dan met de gekozen separabele potentiaal. We beginnen hiertoe met het uitrekenen van het transitie matrix element $T(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$, waaruit een vergelijking voor de verstrooiingsamplitude kan afgeleid worden. Deze kan vergeleken worden met de scattering lengte a zoals afgeleid voor de contact interactie en gegeven in vergelijking (3.14). De separabele potentiaal die wij in deze sectie zullen gebruiken bestaat uit een stapfunctie, welke dus een limiet/cutoff oplegt voor de momenta van de inkomende en uitgaande deeltjes, vermenigvuldigd met een bepaalde sterkte g :

$$\langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle = g \Theta(\Lambda - \mathbf{k}') \Theta(\Lambda - \mathbf{k}). \quad (3.15)$$

Om de T -matrix uit te rekenen voor deze specifieke potentiaal kan vanaf de Lippmann-Schwinger vergelijking, zoals gegeven in vgl. (2.22), gestart worden door langs rechts in te werken met de toestand $\mathbf{k}$ en langs links met de toestand $\mathbf{k}'$:

$$\langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle = \langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle + \langle \mathbf{k}' | V G_0 T | \mathbf{k} \rangle. \quad (3.16)$$

Om opnieuw een integraal vergelijking te verkrijgen kan nu een volledige basis worden toegevoegd tussen de Greense functie en de T -matrix in het rechterlid:

$$\langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle = \langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle + \left\langle \mathbf{k}' \left| V G_0 \left[\int d\mathbf{k}'' |\mathbf{k}''\rangle \langle \mathbf{k}''| \right] T \right| \mathbf{k} \right\rangle. \quad (3.17)$$

Zoals eerder geïntroduceerd in sectie (2.1), heeft de ongestoorde Greense functie de volgende vorm,

$$G_0 = \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon}, \quad (3.18)$$

dus wanneer deze Greense functie inwerkt op een toestand $|\mathbf{k}\rangle$, dan wordt deze (met $\hbar = 1$) gegeven door

$$G_0 = \frac{1}{E - \mathbf{k}^2/2\mu + i\varepsilon}. \quad (3.19)$$

Dit kan ingevuld worden in de Lippmann-Schwinger vergelijking hierboven:

$$\langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle = \langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle + \int d\mathbf{k}'' \left\langle \mathbf{k}' \left| V \frac{1}{E - \mathbf{k}''^2/2\mu + i\varepsilon} \right| \mathbf{k}'' \right\rangle \langle \mathbf{k}'' | T | \mathbf{k} \rangle. \quad (3.20)$$

Nu kan de vorm van onze separabele potentiaal hierin gesubstitueerd worden,

$$\langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle = g \Theta(\Lambda - \mathbf{k}') \Theta(\Lambda - \mathbf{k}) + g \int d\mathbf{k}'' \Theta(\Lambda - \mathbf{k}') \Theta(\Lambda - \mathbf{k}'') \frac{1}{E - \mathbf{k}''^2/2\mu + i\varepsilon} \langle \mathbf{k}'' | T | \mathbf{k} \rangle. \quad (3.21)$$

In de tweede term in het rechterlid kan deze integraal nu opnieuw in zichzelf worden ingevuld, wat geeft dat

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle &= g \Theta(\Lambda - \mathbf{k}') \Theta(\Lambda - \mathbf{k}) \\ &+ g^2 \int d\mathbf{k}'' \Theta(\Lambda - \mathbf{k}') \Theta(\Lambda - \mathbf{k}'') \frac{1}{E - \mathbf{k}''^2/2\mu + i\varepsilon} \Theta(\Lambda - \mathbf{k}'') \Theta(\Lambda - \mathbf{k}) + \dots \end{aligned} \quad (3.22)$$

Deze integraal kan uitgerekend worden in bolcoördinaten. Het angulaire gedeelte kan makkelijk uitgevoerd worden, en geeft een extra factor 4π . De laatste integraal over het radiële gedeelte krijgt een bovengrens Λ door de stapfunctie, en heeft twee mogelijke oplossingen in de limiet van $\varepsilon \rightarrow 0$ [12], gegeven door

$$\int_0^\Lambda dk'' \frac{k''^2}{E - k''^2/2\mu + i\varepsilon} \stackrel{\varepsilon \rightarrow 0}{=} \begin{cases} (2\mu)^{3/2} \sqrt{E} \operatorname{arctanh}\left(\frac{\Lambda}{\sqrt{2\mu E}}\right) - 2\mu\Lambda & (E \geq \frac{\Lambda^2}{2\mu} \text{ of } E \leq 0) \\ (2\mu)^{3/2} \sqrt{E} \operatorname{arccoth}\left(\frac{\Lambda}{\sqrt{2\mu E}}\right) - 2\mu\Lambda - i\pi\mu^{3/2} \sqrt{2E} & (0 \leq E \leq \frac{\Lambda^2}{2\mu}). \end{cases} \quad (3.23)$$

Voor verstrooiing tussen deeltjes in de lage-energie limiet ($E > 0$ en $E \rightarrow 0$), vinden we zo dat de uitdrukking voor de transitie matrix overeenkomt met

$$\langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle = g \Theta(\Lambda - \mathbf{k}') \Theta(\Lambda - \mathbf{k}) + 4\pi g^2 \Theta(\Lambda - \mathbf{k}') \Theta(\Lambda - \mathbf{k}) \times \left(-2\Lambda\mu - i\pi\mu^{3/2} \sqrt{2E} + 2\sqrt{2}\mu^{3/2} \sqrt{E + i\varepsilon} \operatorname{arccoth}\left(\frac{\Lambda}{\sqrt{2}\sqrt{E + i\varepsilon}}\right) \right) + \dots \quad (3.24)$$

Het doorvoeren van de $E \rightarrow 0$ limiet in de oplossing van de Greense functie, zodat $\lim_{x \rightarrow \infty} \operatorname{arccoth}(x) \approx 1/x + \mathcal{O}(x^{-3})$, impliceert verder dat de T -matrix in de lage-energie limiet vereenvoudigt tot

$$\langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle = g \Theta(\Lambda - \mathbf{k}') \Theta(\Lambda - \mathbf{k}) + 4\pi g^2 \Theta(\Lambda - \mathbf{k}') \Theta(\Lambda - \mathbf{k}) \left(-2\Lambda\mu - i\pi\mu^{3/2} \sqrt{2E} + \frac{4(E + i\varepsilon)\mu^{3/2}}{\Lambda} \right) + \dots \quad (3.25)$$

Herinner dat de verstrooiingslengte uit de contact interactie gegeven werd door

$$a \approx \frac{g_2}{8\pi} \left(1 - \frac{g_2\Lambda}{4\pi^2} + \dots \right). \quad (3.26)$$

Om in onze berekeningen de verstrooiingslengte a te bepalen, kan de relatie tussen de T -matrix en a gebruikt worden

$$T(E \rightarrow 0) = \frac{a}{4\pi^2\mu}. \quad (3.27)$$

Deze relatie kan bepaald worden door te gebruiken dat in de lage energie limiet alleen s -golf verstrooiing zal bijdragen, in vgl. (2.57) de eerste orde bijdrage te nemen en in te vullen in vgl. (2.35). Daarmee is gekend hoe de verstrooiingsamplitude afhangt van a . Dit kan dan ingevuld worden in vgl. (2.30). Dit geeft dan een verband tussen de T -matrix en de verstrooiingslengte. Wanneer tot slot de lage-energie limiet genomen wordt ($k \rightarrow 0$) wordt bovenstaande vergelijking bekomen.

Wanneer in vergelijking (3.24) $E + i\varepsilon \rightarrow 0$ wordt gekozen, en we werken in de lage-energie limiet dus de stapfuncties zullen benaderend 1 worden, dan wordt de T -matrix gegeven door

$$\langle \mathbf{k}' | T(E \rightarrow 0) | \mathbf{k} \rangle = g - 8\pi\mu g^2 \Lambda + \mathcal{O}(E^{1/2}). \quad (3.28)$$

Dit leidt dan tot

$$a \approx 4\pi^2\mu g (1 - 8\pi\mu g \Lambda + \dots). \quad (3.29)$$

Het valt op dat dit resultaat verschilt met de verstrooiingslengte van de contact versie. Het verschil is echter te wijten aan een verschil in de definitie van de interactie sterkte. Wanneer we in

vergelijking (3.29) de substitutie $g \rightarrow g_2/4 * (2\pi)^{-3}$ met $\mu = 1$, dan komen de uitdrukkingen overeen. Hier volgt de schalingsfactor $1/4$ uit de definitie van de interactiesterke in de Lagrangiaan. De effectieve veldentheorie had een interactie $\mathcal{L}_{int} = -(g_2/4) (\psi^\dagger \psi)^2$, terwijl hier $\mathcal{L}_{int} = -g \Theta(\Lambda - \mathbf{k}') \Theta(\Lambda - \mathbf{k})$ werd gekozen zonder een extra $1/4$. De extra factor $1/(2\pi)^3$ ligt aan het verschil in basis functies en gekozen normalisatie van de theorie.

3.3 Separabele T-matrix

In de vorige sectie werd de oplossing voor de verstrooiingslengte bepaald door met de reeksontwikkeling van de T -matrix te werken, en deze tot een bepaalde orde uit te rekenen. Echter kan er ook een exacte oplossing bepaald worden omdat voor een separabele potentiaal de T -matrix ook separabel zal zijn [55, 56], zodat

$$\langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle = \tau(E, \Lambda) \Theta(\Lambda - \mathbf{k}') \Theta(\Lambda - \mathbf{k}). \quad (3.30)$$

Wanneer we deze vorm voor de transitie matrix gebruiken in vergelijking (3.21), dan kan een oplossing voor $\tau(k_0)$ bepaald worden. Het invullen van de separabele T -matrix geeft

$$\begin{aligned} \tau(E, \Lambda) \Theta(\Lambda - \mathbf{k}') \Theta(\Lambda - \mathbf{k}) &= g \Theta(\Lambda - \mathbf{k}') \Theta(\Lambda - \mathbf{k}) \\ &+ g \int d\mathbf{k}'' \Theta(\Lambda - \mathbf{k}') \Theta(\Lambda - \mathbf{k}'') \frac{1}{E - \mathbf{k}''^2/2\mu + i\varepsilon} \tau(E, \Lambda) \Theta(\Lambda - \mathbf{k}'') \Theta(\Lambda - \mathbf{k}). \end{aligned} \quad (3.31)$$

Aangezien de functie $\tau(E, \Lambda)$ onafhankelijk is van het momentum $\mathbf{k}''$, kan deze buiten de integraal geplaatst worden. Vervolgens hervinden we dan de momentum integraal waarvan de oplossingen gegeven zijn in vgl. (3.23). Deze oplossing wordt even $I(E, \Lambda)$ genoemd om de notaties niet te complex te maken. Hiermee kan een oplossing voor $\tau(E, \Lambda)$ bepaald worden

$$\begin{aligned} \tau(E, \Lambda) &= g [1 + 4\pi \tau(E, \Lambda) I(E, \Lambda)] \\ \Rightarrow \tau(E, \Lambda) &= \frac{g}{1 - 4\pi g I(E, \Lambda)}. \end{aligned} \quad (3.32)$$

De exacte oplossing voor de transitie matrix wordt gegeven door

$$T(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \frac{g \Theta(\Lambda - \mathbf{k}') \Theta(\Lambda - \mathbf{k})}{1 - 4\pi g I(E, \Lambda)}. \quad (3.33)$$

Tot slot, in de lage-energie limiet ($E \rightarrow 0$) nadert de oplossing van de integraal $I(E, \Lambda)$ in laagste orde naar $-2\Lambda\mu$. Hiermee wordt de T -matrix

$$T(E \rightarrow 0) = \frac{g}{1 + 8\pi g \Lambda \mu}. \quad (3.34)$$

De verstrooiingslengte kan uit de T -matrix bepaald worden door te vermenigvuldigen met $4\pi^2\mu$. Zo wordt deze gegeven door

$$a = 4\pi^2 g \mu \left(\frac{1}{1 + 8\pi g \Lambda \mu} \right). \quad (3.35)$$

De exacte oplossing van de contact versie werd gegeven door

$$a = \frac{g_2}{8\pi} \left(\frac{1}{1 + g_2 \Lambda / (4\pi^2)} \right), \quad (3.36)$$

wat terug overeenkomt met onze oplossing via de substitutie $g \rightarrow \frac{g_2}{4} * \frac{1}{(2\pi)^3}$ met $\mu = 1$, consistent met het resultaat dat in de vorige sectie werd afgeleid door middel van de perturbatieve techniek.

3.4 Cutoff afhankelijkheid van a en R_{eff}

Zoals eerder vermeld in de inleiding, bestaat er een verband tussen de faseshift δ_0 en de verstrooiingslengte in de lage-energie limiet. In de vorige subsectie hebben we enkel gekeken naar het laagste orde effect van lage-energie scattering, d.i. $\lim_{k \rightarrow 0} k \cot \delta_0 \approx -1/a$. Echter kan het ook interessant zijn om te kijken naar de hogere energie correcties. Wanneer de reeks tot op orde k^2 wordt uitgerekend, heeft deze de volgende vorm

$$\lim_{k \rightarrow 0} k \cot \delta_0 \approx -\frac{1}{a} + \frac{1}{2} R_{\text{eff}} k^2 + \mathcal{O}(k^4). \quad (3.37)$$

Om de effectieve range R_{eff} te zoeken kan het makkelijkste numeriek gewerkt worden. Wanneer opnieuw dezelfde separabele T -matrix gebruikt wordt als in de vorige subsectie kan de oplossing voor $\tau(E, \Lambda)$ hier wederom gebruikt worden, zie vgl. (3.32). Vervolgens dient de uitdrukking voor de T -matrix te worden gerelateerd aan die van de fase verschuiving. Hiertoe wordt terug gestart vanaf de S -matrix, welke in de inleiding was gedefinieerd volgens vgl. (2.14). In deze formulering werd wel gebruik gemaakt van energie genormaliseerde toestanden. Echter kunnen ook momentum genormaliseerde toestanden gebruikt worden. Met deze normalisatieconditie wordt de scattering-matrix gegeven door [42, 50]

$$\langle \mathbf{k}' | S | \mathbf{k} \rangle = \langle \mathbf{k}' | \mathbf{k} \rangle - 8\pi^2 i k \delta^{(3)}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \langle \mathbf{k}' | T(E_{\mathbf{k}}) | \mathbf{k} \rangle. \quad (3.38)$$

Verder is ook het verband gekend tussen de S -matrix en de verstrooiingsamplitude [5], $f_l = (S_l - 1)/(2ik)$. Tot slot hangt de verstrooiingsamplitude samen met de faseverschuiving via vgl. (2.35). Hieruit kan dan een exacte relatie bepaald worden voor voor de faseverschuiving als functie van de T -matrix:

$$k \cot \delta_l = \frac{-1}{4\pi^2 \mu T(\mathbf{k}', \mathbf{k})} + ik. \quad (3.39)$$

De oplossing van de T -matrix als gegeven in vgl. (3.33) kan nu terug ingevuld worden in de uitdrukking voor de verstrooiingsfaseshift, waarbij nadien voor kleine k een reeksontwikkeling gemaakt kan worden rond $k = 0$. Dit heeft tot op tweede orde in het momentum k de oplossing

$$k \cot \delta_0 \approx \frac{-1 - 8\pi g \Lambda}{4\pi^2 g} + \frac{2k^2}{\pi \Lambda} + \mathcal{O}(k^4). \quad (3.40)$$

Wanneer deze oplossing vergeleken wordt met uitdrukking (3.37), dan kan dus afgeleid worden dat

$$a = \frac{4\pi^2 g \mu}{1 + 8\pi g \mu \Lambda}. \quad (3.41)$$

Dit komt exact overeen met de gevonden analytische uitdrukking voor de verstrooiingslengte uit de vorige subsectie, zie vgl. (3.35). Verder kan afgelezen worden dat

$$R_{\text{eff}} = \frac{4}{\pi \Lambda}. \quad (3.42)$$

De vorm van dit resultaat, $R_{\text{eff}} \propto 1/\Lambda$, had enigszins verwacht kunnen worden. Voor lage-energie verstrooiing, wanneer $\Lambda \gg k$, dan zal de bijdrage van deze term naar nul naderen. Naarmate Λ kleiner en kleiner wordt, zal de effectieve range groter worden.

3.5 Het twee-kanalen model

In deze sectie zal een uitbreiding gemaakt worden van het model, waarbij nu ook verondersteld wordt dat deeltjes met elkaar kunnen interageren via twee verschillende kanalen. Hier zal specifiek gefocust worden op Feshbach resonanties waarbij via het twee-kanalen model wordt gewerkt met een open en een gesloten kanaal. Zoals eerder in sectie (1.3) waar dit in meer detail besproken werd, verwijst hierbij het open kanaal naar de toestand waarbij de deeltjes vrij zijn om met elkaar te scatteren en niet aan elkaar gebonden zijn, terwijl het gesloten kanaal verwijst naar de toestand waar ze dat wel zijn, en dus een soort van molecuul vormen [57, 58].

Voor dit systeem kan de Hamiltoniaan worden weergegeven in matrixvorm, waarbij de Schrödinger vergelijking eruitziet als [42]:

$$\begin{pmatrix} H_{PP}^0 + V_{PP} & V_{PQ} \\ V_{QP} & H_{QQ}^0 + V_{QQ} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\psi_P\rangle \\ |\psi_Q\rangle \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} |\psi_P\rangle \\ |\psi_Q\rangle \end{pmatrix}. \quad (3.43)$$

De twee mogelijke verstrooiingskanalen waarover eerder werden gesproken worden hier voorgesteld met de subindexen P (open) en Q (gesloten). Hierbij verwijzen $H_{PP/QQ}^0$ en $V_{PP/QQ}$ naar resp. het vrije gedeelte en de interacties binnen eenzelfde kanaal (vrije/gebonden toestand). Tot slot stellen V_{QP} en V_{PQ} de koppelingen tussen de twee kanalen voor.

Uit bovenstaande Schrödinger vergelijking volgen twee nieuwe gekoppelde relaties tussen de golf-functies van het open en gesloten kanaal:

$$E |\psi_P\rangle = (H_{PP}^0 + V_{PP}) |\psi_P\rangle + V_{PQ} |\psi_Q\rangle \quad (3.44)$$

$$E |\psi_Q\rangle = (H_{QQ}^0 + V_{QQ}) |\psi_Q\rangle + V_{QP} |\psi_P\rangle. \quad (3.45)$$

Wanneer in de tweede vergelijking de termen met $|\psi_Q\rangle$ en $|\psi_P\rangle$ samen worden genomen, dan krijgt men

$$(E - H_{QQ}^0 - V_{QQ}) |\psi_Q\rangle = V_{QP} |\psi_P\rangle. \quad (3.46)$$

In deze uitdrukking kan de definitie van de totale Greense functie van het gesloten kanaal herkend worden, namelijk $G_{QQ} = (E - H_{QQ})^{-1} = (E - H_{QQ}^0 - V_{QQ})^{-1}$. Deze verschilt dus van de vrije Greense functie $G_{0,QQ} = (E - H_{QQ}^0)^{-1}$, vandaar de afwezigheid van het subscript '0'. Met deze formulering kan de gebonden toestand nu geschreven worden als

$$|\psi_Q\rangle = G_{QQ} V_{QP} |\psi_P\rangle. \quad (3.47)$$

Deze uitdrukking voor de gebonden toestand kan terug ingevuld worden in vergelijking (3.44), waaruit volgt dat

$$\begin{aligned} E |\psi_P\rangle &= (H_{PP}^0 + V_{PP}) |\psi_P\rangle + V_{PQ} G_{QQ} V_{QP} |\psi_P\rangle \\ \Rightarrow G_{PP}^{-1} |\psi_P\rangle &= V_{PQ} G_{QQ} V_{QP} |\psi_P\rangle, \end{aligned} \quad (3.48)$$

met de totale Greense functie van het open kanaal gegeven door $G_{PP} = (E - H_{PP})^{-1}$. Nu kan een oplossing voor $|\psi_P\rangle$ bepaald worden die niet meer van de gebonden toestand afhangt. Echter moet er nog rekening gehouden worden met een beginvoorwaarde, waarbij wanneer dat $V_{QP} \rightarrow 0$, en er dus geen koppeling meer bestaat tussen de twee kanalen, dat $|\psi_P\rangle \rightarrow |\varphi_P\rangle$. Hierbij stelt $|\varphi_P\rangle$ de toestand voor met alleen verstrooiing in het open kanaal, aangezien zonder koppeling de verstrooiingstoestand alleen wordt bepaald door de dynamica binnen het open kanaal. Wanneer er wel een koppeling is tussen de twee kanalen, dan krijgt de volledige open golf-functie dus een

extra bijdrage van het gesloten kanaal via de term $V_{PQ}G_{QQ}V_{QP}|\psi_P\rangle$. Deze term beschrijft dus hoe het open kanaal wordt beïnvloed door het gesloten kanaal, mits de koppeling verschillend is van nul.

Hierdoor wordt de oplossing voor de volledige toestand $|\psi_P\rangle$, met mogelijke koppeling, dus gegeven door

$$|\psi_P\rangle = |\varphi_P\rangle + G_{PP}V_{PQ}G_{QQ}V_{QP}|\psi_P\rangle. \quad (3.49)$$

Aangezien $|\varphi_P\rangle$ alleen de toestanden binnen het open kanaal beschrijft, voldoet deze aan de Schrödinger vergelijking $E|\varphi_P\rangle = (H_{PP}^0 + V_{PP})|\varphi_P\rangle$ en verder ook aan de Lippmann-Schwinger vergelijking in het open kanaal (zie vgl. (2.22)) :

$$|\varphi_P\rangle = |k\rangle + G_{0,PP}V_{PP}|\varphi_P\rangle. \quad (3.50)$$

Deze vergelijking kan ook uitgedrukt worden met de totale Greense functie G_{PP} , i.p.v. de vrije Greense functie $G_{0,PP}$. De relatie tussen de totale en de vrije Greense functie wordt gegeven de Lippmann-Schwinger vergelijking [50]:

$$G^{(\pm)} = G_0^{(\pm)} + G_0^{(\pm)}VG^{(\pm)}. \quad (3.51)$$

Wanneer vergelijking (3.50) herhalend in zichzelf ingevuld wordt, dan kan de expressie voor de totale Greense functie hierin herkend worden. Hierdoor wordt de uitdrukking voor toestand in het open kanaal gegeven door

$$|\varphi_P^{(\pm)}\rangle = |k\rangle + G_{PP}^{(\pm)}V_{PP}|k\rangle. \quad (3.52)$$

Verder kan vergelijking (3.48) ook geschreven worden als

$$E|\psi_P\rangle = (H_{PP}^0 + V_{\text{eff}})|\psi_P\rangle, \text{ met } V_{\text{eff}} = V_{PP} + V_{PQ}G_{QQ}V_{QP}. \quad (3.53)$$

De transitie matrix kan dan weer bepaald worden via de definitie $T|k\rangle = V_{\text{eff}}|\psi_P\rangle$, waarbij deze transitie matrix het gedeelte van het open kanaal voorstelt:

$$\langle \mathbf{k}'|T|\mathbf{k}\rangle = \langle \mathbf{k}'|V_{PP}|\psi_P\rangle + \langle \mathbf{k}'|V_{PQ}G_{QQ}V_{QP}|\psi_P\rangle. \quad (3.54)$$

In de eerste term aan de rechterkant van deze vergelijking kan de oplossing voor $|\psi_P\rangle$ (vgl.(3.49)) worden gesubstitueerd:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}'|T|\mathbf{k}\rangle &= \langle \mathbf{k}'|V_{PP}|\varphi_P\rangle + \langle \mathbf{k}'|V_{PP}G_{PP}V_{PQ}G_{QQ}V_{QP}|\psi_P\rangle + \langle \mathbf{k}'|V_{PQ}G_{QQ}V_{QP}|\psi_P\rangle \\ \Rightarrow \langle \mathbf{k}'|T|\mathbf{k}\rangle &= \langle \mathbf{k}'|V_{PP}|\varphi_P\rangle + \langle \mathbf{k}'|(1 + V_{PP}G_{PP})V_{PQ}G_{QQ}V_{QP}|\psi_P\rangle. \end{aligned} \quad (3.55)$$

In deze laatste vergelijking kan de uitdrukking van $|\varphi_P\rangle$ herkend worden in de tweede term in het rechterlid, zie vgl. (3.52), waaruit volgt dat $\langle \varphi_P^-| = \langle k| + \langle k|V_{PP}G_{PP}^+$. Door dit voorgaande te substitueren in vgl. (3.55) komt er

$$\langle \mathbf{k}'|T|\mathbf{k}\rangle = \langle \mathbf{k}'|V_{PP}|\varphi_P\rangle + \langle \varphi_P^-|V_{PQ}G_{QQ}V_{QP}|\psi_P\rangle. \quad (3.56)$$

De Greense functie van het gesloten kanaal kan verder uitgeschreven worden in zijn spectrale decompositie. Wanneer de energie ν van een van de gebonden toestanden dicht bij de scattering energie ligt, en de andere gebonden toestanden en continuüm toestanden ver niet-resonant zijn,

kan enkel de nabije gebonden toestand $|\phi_i\rangle$ in de decompositie behouden worden. Deze benadering, vaak gebruikt in het Feshbach formalisme, staat bekend als de ‘single-resonance approximation’ [46, 47, 58–60]. Door gebruik te maken van deze benadering, vinden we dat de Greense functie in het gesloten kanaal kan worden geschreven als

$$G_{QQ}(E) = \frac{|\phi_i\rangle\langle\phi_i|}{E - \nu}, \quad (3.57)$$

waarbij ν de energie van de gebonden toestanden voorstelt, die evenals de energie E_c zoals weergegeven in figuur 1, gemeten is ten opzichte van het energetische nulpunt. De bovenstaande Greense functie kan ingevuld worden in de uitdrukking voor de T -matrix:

$$\langle\mathbf{k}'|T|\mathbf{k}\rangle = \langle\mathbf{k}'|V_{PP}|\varphi_P\rangle + \frac{\langle\varphi_P^-|V_{PQ}|\phi_i\rangle\langle\phi_i|V_{QP}|\psi_P\rangle}{E - \nu}. \quad (3.58)$$

Deze uitdrukking hangt nog af van de totale verstrooiingstoestand $|\psi_P\rangle$ in het open kanaal, welke nog niet gekend is. Echter valt deze te elimineren uit de uitdrukking van de T -matrix door in vergelijking (3.49) V_{QP} te laten inwerken, en nadien te projecteren op $\langle\phi_i|$:

$$\langle\phi_i|V_{QP}|\psi_P\rangle = \langle\phi_i|V_{QP}|\varphi_P\rangle + \langle\phi_i|V_{QP}G_{PP}V_{PQ}G_{QQ}V_{QP}|\psi_P\rangle \quad (3.59)$$

Hierin kan de uitdrukking voor de Greense functie G_{QQ} van het gesloten kanaal terug ingevuld worden,

$$\langle\phi_i|V_{QP}|\psi_P\rangle = \langle\phi_i|V_{QP}|\varphi_P\rangle + \frac{\langle\phi_i|V_{QP}G_{PP}V_{PQ}|\phi_i\rangle\langle\phi_i|V_{QP}|\psi_P\rangle}{E - \nu}. \quad (3.60)$$

Deze uitdrukking kan opgelost worden naar $\langle\phi_i|V_{QP}|\psi_P\rangle$, waaruit volgt dat

$$\langle\phi_i|V_{QP}|\psi_P\rangle = \frac{\langle\phi_i|V_{QP}|\varphi_P\rangle}{1 - \langle\phi_i|V_{QP}G_{PP}V_{PQ}|\phi_i\rangle/(E - \nu)}. \quad (3.61)$$

Deze brakket is dezelfde als degene in de uitdrukking voor de transitie matrix, dus deze kan hierin ingevuld worden:

$$\begin{aligned} \langle\mathbf{k}'|T|\mathbf{k}\rangle &= \langle\mathbf{k}'|V_{PP}|\varphi_P\rangle + \frac{\langle\varphi_P^-|V_{PQ}|\phi_i\rangle}{E - \nu} \times \frac{\langle\phi_i|V_{QP}|\varphi_P\rangle}{1 - \langle\phi_i|V_{QP}G_{PP}V_{PQ}|\phi_i\rangle/(E - \nu)} \\ \Rightarrow \langle\mathbf{k}'|T|\mathbf{k}\rangle &= \langle\mathbf{k}'|V_{PP}|\varphi_P\rangle + \frac{\langle\varphi_P^-|V_{PQ}|\phi_i\rangle\langle\phi_i|V_{QP}|\varphi_P\rangle}{E - \nu - \langle\phi_i|V_{QP}G_{PP}V_{PQ}|\phi_i\rangle}. \end{aligned} \quad (3.62)$$

Merk op dat ψ_p nu niet meer voorkomt in deze uitdrukkingen. Met de definitie van een T -matrix T_{PP} die alleen directe scattering processen in het open kanaal aanduidt, kan tot slot de eerste brakket in het rechterlid nog herschreven worden, waardoor de finale uitdrukking voor de transitie matrix gegeven wordt door

$$\boxed{\langle\mathbf{k}'|T|\mathbf{k}\rangle = \langle\mathbf{k}'|T_{PP}|\mathbf{k}\rangle + \frac{\langle\varphi_P^-|V_{PQ}|\phi_i\rangle\langle\phi_i|V_{QP}|\varphi_P\rangle}{E - \nu - \langle\phi_i|V_{QP}G_{PP}V_{PQ}|\phi_i\rangle}}. \quad (3.63)$$

Deze uitdrukking bestaat uit verschillende producten van interactiepotentialen en Greense functies. De termen zullen hieronder afzonderlijk behandeld en opgelost moeten worden. Merk eerst en vooral op dat ook hier gewerkt zal worden met dezelfde separable vorm van de potentialen en transitie matrix als voorheen gebruikt in secties (3.2) en (3.3) voor het één-kanalen model. Ter

verduidelijking schrijven we hieronder de separabele vormen van de T -matrices en potentialen die voorkomen in de vorige vergelijking:

$$T_{PP} = \tau(E, \Lambda) |\xi\rangle \langle \xi| \quad (3.64)$$

$$V_{PP} = g |\xi\rangle \langle \xi| \quad (3.65)$$

$$V_{PQ} = V_{QP} = \alpha |\xi\rangle \langle \xi|, \quad (3.66)$$

waarvoor geldt dat $\langle k|\xi\rangle = \Theta(\Lambda - k)$. De eerste term in vergelijking (3.63) kan hierdoor al herschreven worden met de stapfuncties:

$$\langle \mathbf{k}'|T|\mathbf{k}\rangle = \tau(E, \Lambda) \Theta(\Lambda - \mathbf{k}') \Theta(\Lambda - \mathbf{k}) + \frac{\langle \varphi_P^-|V_{PQ}|\phi_i\rangle \langle \phi_i|V_{QP}|\varphi_P\rangle}{E - \nu - \langle \phi_i|V_{QP}G_{PP}V_{PQ}|\phi_i\rangle}. \quad (3.67)$$

Om de breuk uit de tweede term in de uitdrukking voor de transitie matrix van vgl. (3.67) te berekenen, wordt eerst in meer detail naar de teller gekeken. Neem de tweede braket, waar de separabele vorm van de potentiaal kan worden ingevuld,

$$\begin{aligned} \langle \phi_i|V_{QP}|\varphi_P\rangle &= \alpha \langle \phi_i|\xi\rangle \langle \xi|\varphi_P\rangle \\ &= \beta \langle \xi|\varphi_P\rangle, \end{aligned} \quad (3.68)$$

waarbij de substitutie $\beta = \alpha \langle \phi_i|\xi\rangle$ werd doorgevoerd, wat de notatie wat vergemakkelijkt. Nu kunnen we op een gelijkaardige manier te werk gaan als eerder in sec. (3.2) voor de bepaling van de T -matrix voor een enkel-kanaal systeem door een volledige momentum basis toe te voegen:

$$\begin{aligned} \langle \phi_i|V_{QP}|\varphi_P\rangle &= \int d\mathbf{k}'' \beta \langle \xi|\mathbf{k}''\rangle \langle \mathbf{k}''|\varphi_P\rangle \\ &= \int d\mathbf{k}'' \beta \Theta(\Lambda - \mathbf{k}'') \langle \mathbf{k}''|\varphi_P\rangle. \end{aligned} \quad (3.69)$$

Herinner dat $|\varphi_P\rangle$ enkel de toestanden in het open kanaal beschrijft en voldeed aan de Lippmann-Schwinger vergelijking $|\varphi_P\rangle = |k\rangle + G_{0,PP}V_{PP}|\varphi_P\rangle$. Deze uitdrukking in vgl. (3.69) substitueren geeft vervolgens

$$\langle \phi_i|V_{QP}|\varphi_P\rangle = \int d\mathbf{k}'' \beta \Theta(\Lambda - \mathbf{k}'') [\langle \mathbf{k}''|\mathbf{k}\rangle + \langle \mathbf{k}''|G_{0,PP}V_{PP}|\varphi_P\rangle]. \quad (3.70)$$

Nu kan de definitie van de T -matrix in het open kanaal gebruikt worden, nl. dat $V_{PP}|\varphi_P\rangle = T_{PP}|\mathbf{k}\rangle$. Wanneer deze relatie toegepast wordt hierboven, dan kan de onbekende $|\varphi_P\rangle$ verwijderd worden uit de uitdrukking, zodat

$$\langle \phi_i|V_{QP}|\varphi_P\rangle = \int d\mathbf{k}'' \beta \Theta(\Lambda - \mathbf{k}'') [\langle \mathbf{k}''|\mathbf{k}\rangle + \langle \mathbf{k}''|G_{0,PP}T_{PP}|\mathbf{k}\rangle]. \quad (3.71)$$

Nu kan de separabele vorm van de transitie matrix ingevuld worden, en gebruiken we expliciet de orthogonaliteit van de momentum basis toestanden, zodat

$$\langle \phi_i|V_{QP}|\varphi_P\rangle = \int d\mathbf{k}'' \beta \Theta(\Lambda - \mathbf{k}'') [\delta(\mathbf{k}'' - \mathbf{k}) + \langle \mathbf{k}''|G_{0,PP}\tau(E, \Lambda)|\xi\rangle \langle \xi|\mathbf{k}\rangle]. \quad (3.72)$$

Tot slot kan de vrije Greense functie ook ingevuld worden, en kan deze naar links inwerken op de toestand met momentum k'' :

$$\begin{aligned} \langle \phi_i|V_{QP}|\varphi_P\rangle &= \int d\mathbf{k}'' \beta \Theta(\Lambda - \mathbf{k}'') \left[\delta(\mathbf{k}'' - \mathbf{k}) + \frac{\tau(E, \Lambda) \langle \mathbf{k}''|\xi\rangle \langle \xi|\mathbf{k}\rangle}{E - k''/2 + i\varepsilon} \right] \\ &= \int d\mathbf{k}'' \beta \Theta(\Lambda - \mathbf{k}'') \left[\delta(\mathbf{k}'' - \mathbf{k}) + \frac{\tau(E, \Lambda) \Theta(\Lambda - \mathbf{k}'') \Theta(\Lambda - \mathbf{k})}{E - k''/2 + i\varepsilon} \right]. \end{aligned} \quad (3.73)$$

De integraal van de eerste term kan gemakkelijk opgelost worden met behulp van de delta functie in het integrandum:

$$\langle \phi_i | V_{QP} | \varphi_P \rangle = \beta \left[1 + \int d\mathbf{k}'' \tau(E, \Lambda) \frac{\Theta(\Lambda - \mathbf{k}'') \Theta(\Lambda - \mathbf{k})}{E - k''/2 + i\varepsilon} \right]. \quad (3.74)$$

Dit kan verder opgelost worden in sferische coördinaten, wat de uitdrukking verder vereenvoudigd tot

$$\langle \phi_i | V_{QP} | \varphi_P \rangle = \beta \left[1 + 4\pi \int_0^\Lambda dk'' k''^2 \tau(E, \Lambda) \frac{\Theta(\Lambda - k'')}{E - k''/2 + i\varepsilon} \right]. \quad (3.75)$$

Deze integraal in de tweede term komt exact opnieuw overeen met de integraal die voorkwam in de T -matrix voor het enkel-kanalen systeem, en waarvan de oplossing gegeven staat in vgl. (3.23). We kunnen hiermee nu concluderen dat

$$\langle \phi_i | V_{QP} | \varphi_P \rangle = \beta [1 + 4\pi \tau(E, \Lambda) \Theta(\Lambda - k) I(E, \Lambda)], \quad (3.76)$$

waarbij we wederom de notatie $I(E, \Lambda)$ gebruiken om de oplossingen gepresenteerd in vgl. (3.23) aan te duiden. Merk op dat de andere term in de teller, namelijk $\langle \varphi_P^- | V_{PQ} | \phi_i \rangle$, op eenzelfde manier kan uitgewerkt worden en correspondeert met het complex toegevoegde van de bovenstaande oplossing. Hiermee vinden we dus dat de totale teller uit de tweede term uit het rechterlid van vgl. (3.63) gelijk is aan

$$\langle \varphi_P^- | V_{PQ} | \phi_i \rangle \langle \phi_i | V_{QP} | \varphi_P \rangle = |\beta [1 + 4\pi \tau(E, \Lambda) \Theta(\Lambda - k) I(E, \Lambda)]|^2. \quad (3.77)$$

Voor de noemer van de tweede term in de transitie matrix kan een soortgelijke analyse gedaan worden als hierboven. De term die we hier willen uitwerken is $\langle \phi_i | V_{QP} G_{PP} V_{PQ} | \phi_i \rangle$. De separabele vorm van de interactie potentialen invullen geeft

$$\begin{aligned} \langle \phi_i | V_{QP} G_{PP} V_{PQ} | \phi_i \rangle &= \alpha^2 \langle \phi_i | \xi \rangle \langle \xi | G_{PP} | \xi \rangle \langle \xi | \phi_i \rangle \\ &= \beta^2 \langle \xi | G_{PP} | \xi \rangle. \end{aligned} \quad (3.78)$$

Hier kunnen opnieuw twee momentum basissen tussengevoegd worden:

$$\begin{aligned} \langle \phi_i | V_{QP} G_{PP} V_{PQ} | \phi_i \rangle &= \beta^2 \int d\mathbf{k}'' \int d\mathbf{k}''' \langle \xi | \mathbf{k}'' \rangle \langle \mathbf{k}'' | G_{PP} | \mathbf{k}''' \rangle \langle \mathbf{k}''' | \xi \rangle \\ &= \beta^2 \int d\mathbf{k}'' \int d\mathbf{k}''' \Theta(\Lambda - k'') \langle \mathbf{k}'' | G_{PP} | \mathbf{k}''' \rangle \Theta(\Lambda - k'''). \end{aligned} \quad (3.79)$$

Deze uitdrukking is lastig verder op te lossen omdat de totale Greense functie G_{PP} uit het open kanaal niet direct gekend is. Echter kan deze wel herschreven worden in functie van de transitie matrix via de Lipmann-Schwinger vergelijking

$$G_{PP} = G_{0,PP} + G_{0,PP} T_{PP} G_{0,PP}. \quad (3.80)$$

Het invullen van de bovenstaande Lipmann-Schwinger vergelijking in vgl. (3.79) levert

$$\begin{aligned} \langle \phi_i | V_{QP} G_{PP} V_{PQ} | \phi_i \rangle &= \beta^2 \int d\mathbf{k}'' \int d\mathbf{k}''' \Theta(\Lambda - k'') \Theta(\Lambda - k''') \\ &\quad \times (\langle \mathbf{k}'' | G_{0,PP} | \mathbf{k}''' \rangle + \langle \mathbf{k}'' | G_{0,PP} T_{PP} G_{0,PP} | \mathbf{k}''' \rangle). \end{aligned} \quad (3.81)$$

Hierin kunnen de vrije Greense functie en de separabele transitie matrix ingevuld worden:

$$\begin{aligned}
 \langle \phi_i | V_{QP} G_{PP} V_{PQ} | \phi_i \rangle &= \beta^2 \int d\mathbf{k}'' \int d\mathbf{k}''' \Theta(\Lambda - \mathbf{k}'') \Theta(\Lambda - \mathbf{k}''') \\
 &\quad \times \left(\frac{\delta(\mathbf{k}'' - \mathbf{k}''')}{E - k''^2/2 + i\varepsilon} + \tau(E, \Lambda) \frac{\langle \mathbf{k}'' | \xi \rangle}{E - k''^2/2 + i\varepsilon} \frac{\langle \xi | \mathbf{k}''' \rangle}{E - k'''^2/2 + i\varepsilon} \right) \\
 &= \beta^2 \int d\mathbf{k}'' \int d\mathbf{k}''' \Theta(\Lambda - \mathbf{k}'') \Theta(\Lambda - \mathbf{k}''') \\
 &\quad \times \left(\frac{\delta(\mathbf{k}'' - \mathbf{k}''')}{E - k''^2/2 + i\varepsilon} + \tau(E, \Lambda) \frac{\Theta(\Lambda - k'')}{E - k''^2/2 + i\varepsilon} \frac{\Theta(\Lambda - k''')}{E - k'''^2/2 + i\varepsilon} \right). \quad (3.82)
 \end{aligned}$$

In de eerste term kan de integraal over $\mathbf{k}'''$ geëlimineerd worden via de delta functie, waardoor de uitdrukking neerkomt op

$$= \beta^2 \left(\int d\mathbf{k}'' \frac{\Theta(\Lambda - k'')}{E - k''^2/2 + i\varepsilon} + \int d\mathbf{k}'' \int d\mathbf{k}''' \tau(E, \Lambda) \frac{\Theta(\Lambda - k'')}{E - k''^2/2 + i\varepsilon} \frac{\Theta(\Lambda - k''')}{E - k'''^2/2 + i\varepsilon} \right). \quad (3.83)$$

Deze integralen kunnen weer met bolcoördinaten opgelost worden:

$$= \beta^2 \left(\int_0^\Lambda dk'' 4\pi \frac{k''^2}{E - k''^2/2 + i\varepsilon} + (4\pi)^2 \tau(E, \Lambda) \int_0^\Lambda dk'' \frac{k''^2}{E - k''^2/2 + i\varepsilon} \int_0^\Lambda dk''' \frac{k'''^2}{E - k'''^2/2 + i\varepsilon} \right). \quad (3.84)$$

Deze integralen zijn opnieuw alle drie dezelfde integraal als voorheen, dus kan er geconcludeerd worden dat

$$\langle \phi_i | V_{QP} G_{PP} V_{PQ} | \phi_i \rangle = \beta^2 [4\pi I(E, \Lambda) + 16\pi^2 \tau(E, \Lambda) I^2(E, \Lambda)]. \quad (3.85)$$

Tot slot kan alles terug ingevuld worden in de uitdrukking voor de T -matrix, wat resulteert in

$$\langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle = \langle \mathbf{k}' | T_{PP} | \mathbf{k} \rangle + \frac{\beta^2 [1 + 4\pi \tau(E, \Lambda) \Theta(\Lambda - \mathbf{k}) I(E, \Lambda)]^2}{E - \nu - \beta^2 [4\pi I(E, \Lambda) + 16\pi^2 \tau(E, \Lambda) I^2(E, \Lambda)]}. \quad (3.86)$$

De transitie matrix T_{PP} kan verder overgenomen worden uit sectie (3.3), zodat we ten slotte vinden dat

$$\boxed{\langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle = \frac{g \Theta(\Lambda - \mathbf{k}') \Theta(\Lambda - \mathbf{k})}{1 - g I(E, \Lambda) / (2\pi^2)} + \frac{\beta^2 [1 + 4\pi \tau(E, \Lambda) \Theta(\Lambda - \mathbf{k}) I(E, \Lambda)]^2}{E - \nu - \beta^2 [4\pi I(E, \Lambda) + 16\pi^2 \tau(E, \Lambda) I^2(E, \Lambda)]}} \quad (3.87)$$

Herinner dat de bovenstaande T -matrix in feite is opgebouwd uit twee processen. Namelijk, een eerste proces, weergegeven door de eerste term, waarbij twee deeltjes direct met elkaar wisselwerken (in het open kanaal) en vervolgens weer terug uiteen gaan als twee aparte deeltjes. En vervolgens een tweede proces, weergegeven door de tweede term in vgl. (3.87), waarbij twee aparte atomen samenkomen en zich via de koppeling naar het gesloten kanaal aan elkaar binden tot een molecuul, voordat ze vervolgens weer opbreken en verder propageren als vrije deeltjes in het open kanaal. Om nu specifiek te kunnen kijken naar het koppelingsgedeelte, zal de eerste term vanaf hier verwaarloosd worden. De T -matrix die overblijft wordt dan gegeven door

$$\langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle = \frac{\beta^2 (1 + 4\pi \tau(E, \Lambda) I(E, \Lambda))^2}{E - \nu - \beta^2 (4\pi I(E, \Lambda) + 16\pi^2 \tau(E, \Lambda) I^2(E, \Lambda))}, \quad (3.88)$$

wat uiteindelijk vereenvoudigd kan worden tot

$$\langle \mathbf{k}' | T(E \rightarrow 0) | \mathbf{k} \rangle \stackrel{(0^e \text{ orde})}{=} \frac{\beta^2}{-\nu + 8\pi\mu\Lambda\beta^2}, \quad (3.89)$$

waarbij we, vanwege het ontbreken van directe interacties in het open-kanaal, hebben gebruikt dat $g = \tau = 0$, en waar we verder de integraal $I(E, \Lambda)$ hebben benaderd met de laagste orde energie term $I(E \rightarrow 0, \Lambda) \approx -2\Lambda\mu$.

3.5.1 Cutoff afhankelijkheid van a en R_{eff} in het twee-kanalen model

Net zoals in de sectie (3.4) bij de één-kanaal verstrooiingen werd onderzocht hoe de s -golf verstrooiingslengte en de effectieve dracht R_{eff} afhangen van Λ , kan dat hier ook herhaald worden voor de twee-kanalen verstrooiingen. In de vorige sectie was gekomen dat

$$a(\Lambda) = \frac{4\pi^2 g \mu}{1 + 8\pi\mu g \Lambda} \text{ en } R_{\text{eff}}(\Lambda) = \frac{4}{\pi\Lambda}.$$

Met de nieuwe uitdrukking voor de twee-kanalen T -matrix uit vergelijking (3.87) kan nu numeriek een expansie gemaakt worden voor kleine momenta k tot op tweede orde, waarbij opnieuw alleen de bijdrage van de tweede term wordt beschouwd. Ook wordt er zoals hierboven ook verondersteld dat er in de lage-energie limiet gewerkt wordt en $g \rightarrow 0$. Voor de reeksexpansie wordt dan hier gekomen dat

$$k \cot \delta_0 \approx -\frac{\nu + 8\pi\mu\beta^2\Lambda}{4\mu\pi^2\beta^2} + \frac{16\pi\mu^2\beta^2 - \Lambda}{8\pi^2\mu^2\beta^2\Lambda} k^2 + \mathcal{O}(k^4). \quad (3.90)$$

Hieruit valt af te lezen dat

$$a(\Lambda) = \frac{4\pi^2\beta^2\mu}{\nu + 8\pi\mu\beta^2\Lambda} \text{ en } R_{\text{eff}}(\Lambda) = \frac{4}{\pi\Lambda} - \frac{1}{4\pi^2\mu^2\beta^2}. \quad (3.91)$$

Wanneer de vergelijking voor de effectieve dracht geschreven wordt als $R_{\text{eff}} = 4/\pi\Lambda - 2R_*$ [61], dan worden de volgende twee relaties afgeleid,

$$\beta^2 = \frac{1}{8\pi^2\mu^2 R_*}, \quad (3.92)$$

$$\nu = -\frac{1}{2\mu R_*} \left(\frac{1}{a} - \frac{2\Lambda}{\pi} \right). \quad (3.93)$$

Hierbij is R_* de effectieve lengteschaal voor de resonantie-breedte, en kan gelinkt worden aan de energetische breedte van een Feshbach resonantie Δ als geïntroduceerd in vgl. (1.7) als $R_* = \hbar^2/(2\mu a_{bg}\Delta)$ [12, 62], met $\delta\mu$ het verschil in magnetisch moment tussen het open en gesloten kanaal. De breedte van een resonantie is vaak bepalend voor het gebruik van een enkel-kanalen of twee-kanalen model [45]. In deze thesis zal het twee-kanalen model direct van pas komen vanwege een directe link naar de EFT voor drie-deeltjes interacties, die we in het volgende hoofdstuk zullen bespreken.

4 Het Drie-Deeltjes Probleem

In dit hoofdstuk wordt de EFT zoals eerder besproken in sec. (3.1) uitgebreid met de drie-deeltjes interacties. De Lagrangiaan welke contact interacties veronderstelt tussen deze deeltjes wordt gegeven door [2]

$$\mathcal{L} = \psi^\dagger \left(i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2} \nabla^2 \right) \psi - \frac{g_2}{4} (\psi^\dagger \psi)^2 - \frac{g_3}{36} (\psi^\dagger \psi)^3. \quad (4.1)$$

De laatste interactie term beschrijft dus een verstrooiing waarbij in totaal een zespuntsinteractie voorkomt. Drie inkomende deeltjes komen hier samen, interageren, gaan vervolgen daarna weer hun pad als drie aparte deeltjes. De zespuntsinteractie is net zoals bij het twee-deeltjes proces een contact interactie, waarbij deze dus alleen verschillend is van nul wanneer de drie deeltjes zich bovenop elkaar bevinden, $V(x, y, z) = g_3 \delta(x - y) \delta(x - z) / 36$.

Het doel van dit hoofdstuk is om een mathematisch framework uit te werken waarmee het kwantummechanische drie-deeltjes probleem bestudeerd kan worden. Hierbij zal een gelijkaardige werkwijze gevolgd worden als bij de twee-deeltjes analyse, zoals gepresenteerd in hoofdstuk 3. De belangrijkste grootheid daar werd gegeven door de vierpunts Greense functie, waarvan het geconnecteerde gedeelte direct gerelateerd kon worden aan het scattering amplitude $i\mathcal{A}$. Hier kan de Greense functie ook berekend worden. Echter, voor het drie-deeltjes probleem, betreft dit een zespunts Greense functie $G = \langle \mathcal{T} [\psi \psi \psi \psi^\dagger \psi^\dagger \psi^\dagger] \rangle$. De diagrammen die hieruit voorkomen staan weergegeven in figuur 7.

In deze figuur wordt de drie-deeltjes verstrooiingsamplitude $i\mathcal{A}$ weergegeven. Analooq aan twee-deeltjes scattering, volgt deze amplitude uit het afgebroken en geconnecteerde gedeelte van de drie-deeltjes Greense functie. De integraalweergave van de amplitude in figuur 7 bevat zowel vierpunts vertices met vertexfactoren $-ig_2$, als zespunts vertices met vertexfactoren $-ig_3$. Vanwege de zespuntsinteractie wordt de drie-deeltjes verstrooiingsamplitude heel snel heel complex om uit te rekenen. Echter bestaat er een handige manier om het systeem via een transformatie toch iets minder complex te maken, waar in de volgende sectie dieper op ingegaan zal worden.

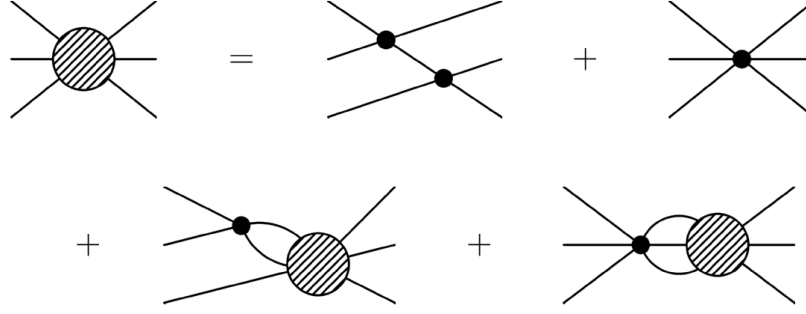
4.1 De truc met het paarveld

Het idee achter het vereenvoudigen van de EFT zoals gepresenteerd in vgl. (4.1) bestaat uit het invoeren van een nieuw effectief veld d , wat een molecule (ofwel ‘diatom’) voorstelt. Dit veld stelt een paar voor van twee van de drie deeltjes welke een gebonden toestand vormen. De introductie van dit nieuwe veld herleidt de interacties tussen drie velden tot een interactie tussen twee velden. Hierbij interageert een paar van twee deeltjes, beschreven door het paarveld d , met een derde, vrij deeltje ψ .

Deze methode wordt de truc met het paarveld (‘diatom field trick’) genoemd [2, 26, 34]. Hiermee kan een effectieve Lagrangiaan opgesteld worden, welke nu hoogstens quartische termen in de velden d en ψ bevat. Dit houdt in dat er een tweepunts interactie kan bestaan tussen twee moleculen $dd^\dagger$, de overgang van een molecuul naar twee vrije atomen $d\psi^{\dagger 2}$ (en omgekeerd $d^\dagger\psi^2$), en tot slot de vierpunts interactie tussen een deeltje en een molecule $d^\dagger d \psi^\dagger \psi$. Tezamen met de twee-deeltjes interacties wordt de Lagrangiaan dan gegeven door

$$\mathcal{L} = \psi^\dagger \left(i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2} \nabla^2 \right) \psi + \frac{g_2}{4} d^\dagger d - \frac{g_2}{4} (d^\dagger \psi^2 + \psi^{\dagger 2} d) - \frac{g_3}{36} d^\dagger d \psi^\dagger \psi. \quad (4.2)$$

Uit deze voorstelling van de Lagrangiaan kan ook direct de vrije Greense functie voor het diatom veld afgelezen worden. Deze Lagrangiaan kan geschreven worden als een kwadratisch gedeelte in



Figuur 7: Dyson sommatie van de drie-deeltjes verstrooiingsamplitude $\mathcal{A}$ in integraal vorm. Figuur overgenomen uit [2].

het veld ψ , een kwadratisch gedeelte in het veld d , en verder nog drie interactie termen tussen de twee velden:

$$\mathcal{L} = \psi^\dagger A \psi + d^\dagger B d - \text{interactie} \quad (4.3)$$

Door de Lagrangiaan in deze vorm te noteren kan de vrije Greense functie D_0 van het veld d bepaald worden via $iB^{-1} = D_0$. Zo kan dus geconcludeerd worden dat $D_0 = 4i/g_2$.

Het feit dat de drie-deeltjes fysica van de Lagrangiaan van de oorspronkelijke EFT overeenkomt met de fysica van de Lagrangiaan met het paarveld kan geverifieerd worden door te kijken naar de Euler-Lagrange bewegingsvergelijking [2, 26, 34]. Herinner dat deze werd gegeven door

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} = \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}}, \quad (4.4)$$

voor een algemene coördinaat q . De bewegingsvergelijking kan nu uitgerekend worden voor het toegevoegde veld $d^\dagger$. De uitdrukking die dan wordt bekomen ziet eruit als

$$\frac{g_2}{4} d - \frac{g_2}{4} \psi^2 - \frac{g_3}{36} d \psi^\dagger \psi = 0. \quad (4.5)$$

Hieruit kan het veld d worden afgezonderd en geschreven als functie van de ééndeeltjesvelden,

$$d = \frac{\psi^2}{1 - (g_3/9g_2)\psi^\dagger \psi}. \quad (4.6)$$

Dit resultaat kan gesubstitueerd worden in de diatoom-Lagrangiaan uit vergelijking (4.2), wat leidt tot [2]

$$\mathcal{L} = \psi^\dagger \left(i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2} \nabla^2 \right) \psi - \frac{g_2}{4} \frac{(\psi^\dagger \psi)^2}{1 - (g_3/9g_2)\psi^\dagger \psi}. \quad (4.7)$$

Wanneer in deze laatste uitdrukking nu een Taylor ontwikkeling gemaakt wordt in de tweede term in termen van het veld ψ , en enkel de termen tot op derde orde in $\psi\psi^\dagger$ worden overgehouden, dan reduceert de vorige vergelijking tot de oorspronkelijke Lagrangiaan als gepresenteerd in vgl. (4.1). Het feit dat de diatoom Lagrangiaan en de oorspronkelijke EFT Lagrangiaan equivalent zijn tot op de orde van $(\psi\psi^\dagger)^3$, impliceert dat beide formuleringen dezelfde drie-deeltjes fysica beschrijven.

4.2 Hubbard-Stratonovic transformatie

De diatoom versie van de Lagrangiaan kan ook op een andere manier verkregen worden, namelijk door gebruik te maken van padintegraal technieken uit de kwantumveldentheorie (QFT). Het padintegraal formalisme is een methode in de kwantumfysica waarbij rekening wordt gehouden met alle mogelijke trajecten in de ruimtetijd [30, 31, 54]. Elk van deze paden worden doorlopen van een bepaald beginpunt tot een bepaald eindpunt, gewogen met elks hun eigen amplitude corresponderend met het pad. Alle mogelijke waarden in de ruimtetijd bezitten een bepaalde kwantumverdeling. Deze ruimtetijdpunten vormen samen een veld, waarbij dus elke veldconfiguratie $\psi[t, \mathbf{r}]$ mee in rekening gebracht moet worden.

Het gewicht van elke configuratie hangt af van de *actiefunctie* $S[\phi]$. De bewegingsvergelijkingen kunnen dan bepaald worden door de actie te extremaliseren, $\delta S = 0$. Dit is een centrale grootheid in de QFT en kan, analoog aan de klassieke definitie, bepaald worden uit de Lagrangiaan dichtheid via

$$S[\psi] = \int d^4x \mathcal{L}(\psi, \partial_\mu \psi). \quad (4.8)$$

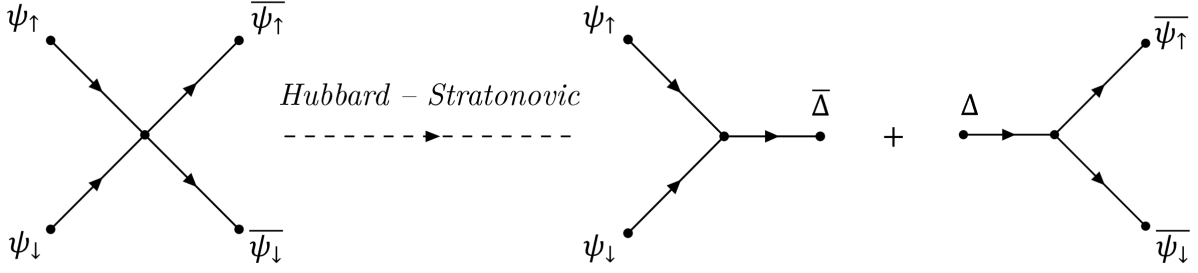
Hierbij loopt de integraal over de tijdscoördinaat, en de drie ruimtelijke coördinaten. Een tweede centrale grootheid in de kwantumveldentheorie is de *toestandssom* $\mathcal{Z}$. Deze stelt de kwantummechanische amplitude voor dat een bepaald veld start in zijn grondtoestand en na een bepaalde tijd terug eindigt in de grondtoestand. De vereiste om rekening te houden met alle mogelijke veld realisaties, kan wiskundig vertaald worden tot de padintegraal over het veld, $\int \mathcal{D}\psi$. Het gewicht dat elk pad krijgt, wordt gegeven door de exponentiële macht van de actie. De som over alle veld configuraties, gewogen met de correcte gewichten, wordt dan gegeven door

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\psi \exp \left(\frac{i}{\hbar} S[\psi] \right). \quad (4.9)$$

Het nuttige van de padintegraalbeschrijving van de kwantumfysica is dat deze integralen het mogelijk maken om correlatiefuncties te berekenen via functionele afgeleiden, waarmee later de Greense functies bepaald kunnen worden en expansies gemaakt kunnen worden in termen van Feynman diagrammen. Voor systemen die beschreven worden door Lagrangianen die hoogstens kwadratisch zijn in de kwantumvelden is de toestandssom exact oplosbaar. Dit is niet algemeen het geval voor interagerende systemen, waarbij interacties schalen met hogere orden van velden. Er zijn echter veel verschillende methoden die het toch mogelijk maken om veel over interagerende systemen te kunnen leren. Een handige truc in QFT is het gebruik van hulpvelden. Een voorbeeld hiervan is de *Hubbard-Stratonovic transformatie* van de Lagrangiaan [30]. Het idee hierachter is om nieuwe bosonische hulpvelden Δ en $\Delta^\dagger$ introduceren, wat de interactie zal vereenvoudigen. Deze velden kunnen gesubstitueerd worden in de interactie termen, waarmee via een Gaussische integraal geverifieerd kan worden dat dit een equivalente beschrijving geeft van het systeem. Voor een schematisch weergave kan gekeken worden naar figuur 8. Het hulpveld Δ stelt hier een paarveld voor tussen twee velden. De introductie van het paarveld maakt het mogelijk om de vierpuntsinteractie in onze padintegralen te herschrijven als

$$\exp \left\{ -g_2 \int d^4x \psi_x^\dagger \psi_x^\dagger \psi_x \psi_x \right\} = \int \mathcal{D}\Delta \int \mathcal{D}\Delta^\dagger \exp \left\{ \int d^4x \left(\frac{\Delta_x^\dagger \Delta_x}{g_2} + \Delta_x^\dagger \psi_x \psi_x + \Delta_x \psi_x^\dagger \psi_x^\dagger \right) \right\}. \quad (4.10)$$

De bovenstaande gelijkheid kan aangetoond worden door het kwadraat in het rechterlid te vervollijken, en te integreren over Δ . Deze techniek kan nu ook gebruikt worden voor de effectieve



Figuur 8: Schematische voorstelling van de Hubbard-Stratonovic transformatie. Hierbij wordt de vierpuntsinteractie tussen de velden ψ vervangen door twee aparte interacties waarbij oftewel twee velden annihileren in het paarveld Δ of het paarveld annihileert in twee aparte velden. (Gebaseerd op [30])

Lagrangiaan $\mathcal{L}(\psi, \psi^\dagger, d, d^\dagger)$ uit de vorige sectie. Wanneer hieruit d (in analogie met Δ) wordt weg geïntegreerd, dan zou de Lagrangiaan $\mathcal{L}(\psi, \psi^\dagger)$ uit vergelijking (4.1) hier terug uit moeten komen. De actiefunctionaal die behoort tot deze Lagrangiaan is

$$\begin{aligned} S[\psi, \psi^\dagger, d, d^\dagger] &= \int d^4x \mathcal{L}(\psi, \psi^\dagger, d, d^\dagger) \\ &= \int d^4x \left[\psi^\dagger \left(i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2} \nabla^2 \right) \psi + \frac{g_2}{4} d^\dagger d - \frac{g_2}{4} (d^\dagger \psi^2 + \psi^{\dagger 2} d) - \frac{g_3}{36} d^\dagger d \psi^\dagger \psi \right]. \end{aligned} \quad (4.11)$$

De toestandssom $\mathcal{Z}$ is gedefinieerd via $\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\psi \int \mathcal{D}\Delta \exp(iS[\psi, \Delta])$ (met $\hbar = 1$), aangezien de padintegraal dient te worden genomen over beide velden ψ en Δ . Voor de Lagrangiaan met het paarveld volgt dan de volgende uitdrukking voor de toestandssom,

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\psi \int \mathcal{D}d \exp \left\{ i \int d^4x \left[\psi^\dagger \left(i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2} \nabla^2 \right) \psi + \frac{g_2}{4} d^\dagger d - \frac{g_2}{4} (d^\dagger \psi^2 + \psi^{\dagger 2} d) - \frac{g_3}{36} d^\dagger d \psi^\dagger \psi \right] \right\}. \quad (4.12)$$

Wanneer alleen de termen beschouwd worden waar het veld d in voorkomt, dan kunnen deze geschreven worden als

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_d &= -\frac{g_2}{4} (d^\dagger \psi^2 + \psi^{\dagger 2} d) + \frac{g_2}{4} d^\dagger d - \frac{g_3}{36} d^\dagger d \psi^\dagger \psi \\ &= -\frac{g_2}{4} \psi^2 d^\dagger - \frac{g_2}{4} \psi^{\dagger 2} d - d^\dagger \left(-\frac{g_2}{4} + \frac{g_3}{36} \psi^\dagger \psi \right) d, \end{aligned} \quad (4.13)$$

waarbij gebruik werd gemaakt van het feit dat al deze velden commuteren met elkaar, aangezien hier gewerkt wordt met bosonische velden. Uit deze laatste vergelijking blijkt dat $\mathcal{L}_d$ een term bevat die alleen afhangt van $d^\dagger$, een term die alleen afhangt van d , en een term die van beiden afhankelijk is. In het framework van de kwantumveldentheorie kan dit genoteerd worden met de notatie

$$\mathcal{L}_d = J[\psi] d^\dagger + J^\dagger[\psi^\dagger] d - d^\dagger A[\psi, \psi^\dagger] d, \quad (4.14)$$

waarbij dus voor ons geldt dat

$$\begin{aligned} J &= -\frac{g_2}{4} \psi^2, \\ J^\dagger &= -\frac{g_2}{4} \psi^{\dagger 2}, \\ A &= -\frac{g_2}{4} + \frac{g_3}{36} \psi^\dagger \psi. \end{aligned}$$

We kunnen vergelijking (4.14) nu op een alternatieve manier opschrijven, waarbij we het kwadraat van $d - J/A$ expliciet vervolledigen volgens

$$\mathcal{L}_d = -A \left(d^\dagger - \frac{J^\dagger}{A} \right) \left(d - \frac{J}{A} \right) + \frac{J^\dagger J}{A}. \quad (4.15)$$

Onze toestandssom gegeven in vergelijking (4.12) kan nu ook op deze manier geschreven worden. Met de grootheden $J, J^\dagger$ en A ingevuld wordt dit (de term die enkel afhankelijk was van ψ en $\psi^\dagger$ blijft onveranderd)

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\psi \int \mathcal{D}d \exp \left\{ i \int d^4x \left[\psi^\dagger \left(i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2} \nabla^2 \right) \psi \right. \right. \\ \left. \left. - \left(-\frac{g_2}{4} + \frac{g_3}{36} \psi^\dagger \psi \right) \left(d^\dagger - \frac{\frac{g_2}{4} \psi^{\dagger 2}}{-\frac{g_2}{4} + \frac{g_3}{36} \psi^\dagger \psi} \right) \left(d - \frac{\frac{g_2}{4} \psi^2}{-\frac{g_2}{4} + \frac{g_3}{36} \psi^\dagger \psi} \right) + \frac{\frac{g_2^2}{16} \psi^{\dagger 2} \psi^2}{-\frac{g_2}{4} + \frac{g_3}{36} \psi^\dagger \psi} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Om dit gemakkelijker op te lossen kan hier nu een verandering in variabelen gemaakt worden. De voorgestelde substitutie wordt $d \rightarrow \tilde{d}$, met $\tilde{d} = d - g_2 \psi^2 (-g_2 + g_3 \psi^\dagger \psi / 9)^{-1}$. Hiermee wordt de integraal

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\psi \int \mathcal{D}\tilde{d} \exp \left\{ i \int d^4x \left[\psi^\dagger \left(i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2} \nabla^2 \right) \psi - \left(-\frac{g_2}{4} + \frac{g_3}{36} \psi^\dagger \psi \right) \tilde{d}^\dagger \tilde{d} - \frac{g_2}{4} \frac{\psi^{\dagger 2} \psi^2}{1 - g_3 \psi^\dagger \psi / 9g_2} \right] \right\}. \quad (4.17)$$

De padintegraal over $\tilde{d}$ kan nu uitgevoerd worden als Gaussische integraal aangezien er nog maar een enkele kwadratische term in $\tilde{d}$ voorkomt in de exponent. Herinner dat de Gaussische integraal gegeven werd door $\int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp(-ax^2/2) = \sqrt{2\pi/a}$. Wanneer dit veralgemeend wordt naar het padintegraal formalisme, waarbij gewerkt wordt met complexe velden, wordt dit gegeven door

$$\int \mathcal{D}\tilde{d} \exp \left\{ -i \int d^4x \tilde{d}^\dagger A \tilde{d} \right\} = 1 / \det(A). \quad (4.18)$$

Dus, de padintegraal geeft nu enkel nog een factor evenredig met de determinant van de coëfficiënt van de kwadratische term in $\tilde{d}$. De toestandssom wordt dan verder

$$\mathcal{Z} = \frac{1}{\det[-g_2/4 + g_3 \psi^\dagger \psi / 36]} \int \mathcal{D}\psi \exp \left\{ i \int d^4x \left[\psi^\dagger \left(i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2} \nabla^2 \right) \psi - \frac{g_2}{4} \frac{\psi^{\dagger 2} \psi^2}{1 - g_3 \psi^\dagger \psi / (9g_2)} \right] \right\}. \quad (4.19)$$

De nieuwe Lagrangiaan zonder het paarveld d wordt gegeven door wat overblijft in de exponent,

$$\mathcal{L}(\psi, \psi^\dagger) = \psi^\dagger \left(i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2} \nabla^2 \right) \psi - \frac{g_2}{4} \frac{\psi^{\dagger 2} \psi^2}{1 - g_3 \psi^\dagger \psi / (9g_2)}. \quad (4.20)$$

We hervinden nu dezelfde Lagrangiaan als voorheen genoteerd in vergelijking (4.7). Hiermee hebben we dus aangetoond dat de truc met het paarveld alternatief uitgewerkt kan worden als Hubbard-Stratonovic transformatie en dus de twee formalismen equivalent zijn.

4.3 Analogie met het twee-kanalen model

Het model dat hierboven werd besproken maakt gebruik van twee verschillende velden, waaronder een vrij veld ψ en een paarveld d . Het vertoont hiermee sterke analogieën met het twee-kanalen model dat eerder werd besproken in sectie (3.5). Het proces dat hier net werd gedaan door de interacties tussen enkele deeltjes te herschrijven naar interacties met een paarveld is echter analoog aan wat er in een twee-kanalen proces gebeurt. Hierbij kunnen in het open kanaal twee deeltjes verstrooien en opnieuw als twee aparte deeltjes uit elkaar gaan, of kunnen de twee deeltjes een gebonden toestand vormen (of andersom). Met de Lagrangiaan die hier beschouwd wordt gelden eigenlijk gelijkaardige regels. Het gebonden molecuul dat wordt gevormd door middel van de koppeling naar het gesloten kanaal staat hier parallel aan het paarveld d , en de vrije atomen in het open kanaal worden voorgesteld door de velden ψ . Hierbij wordt het paarveld beschouwd als het gesloten kanaal. Hoewel de twee beschrijvingen niet identiek zijn, kunnen ze wel aan elkaar gerelateerd worden [42]. Om dit aan te tonen herinneren we ons dat de T -matrix uit het vorige hoofdstuk voor het twee-kanalen model gegeven werd door

$$\langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle = \frac{g \Theta(\Lambda - \mathbf{k}') \Theta(\Lambda - \mathbf{k})}{1 - g I(E, \Lambda) / (2\pi^2)} + \frac{\beta^2 [1 + 4\pi\tau(E, \Lambda) \Theta(\Lambda - \mathbf{k}) I(E, \Lambda)]^2}{E - \nu - \beta^2 [4\pi I(E, \Lambda) + 16\pi^2 \tau(E, \Lambda) I^2(E, \Lambda)]}. \quad (4.21)$$

Hierna werd in sectie (3.5) de stap gemaakt om de eerste term in deze uitdrukking te verwaarlozen. Het verwaarlozen van deze term betekent in feite dat de atomen in het open kanaal alleen verondersteld worden te interageren via de koppeling naar het gesloten kanaal, en geen achtergrond interacties voelen. Het verwaarlozen van directe interacties in het open kanaal stemt overeen met de vorm van de Lagrangiaan als functie van het paarveld d , gegeven in vgl. (4.2). Ook in deze Lagrangiaan is er geen interactieterm meer met $(\psi\psi^\dagger)^2$, welke dus de vertex voorstelt met vier aparte deeltjes (open $\rightarrow$ open kanaal). Zoals besproken in sec. (3.5) reduceert de T -matrix voor het twee-kanalen model zonder achtergrond interacties in de limiet van $E \rightarrow 0$ tot

$$\langle \mathbf{k}' | T(E \rightarrow 0) | \mathbf{k} \rangle \stackrel{(0^e \text{ orde})}{=} \frac{\beta^2}{-\nu + 8\pi\mu\Lambda\beta^2}. \quad (4.22)$$

De overeenkomstige uitdrukking voor de verstrooiingslengte wordt dan gegeven door

$$a = \frac{4\pi^2\beta^2\mu}{-\nu + 8\pi\mu\Lambda\beta^2} \quad (4.23)$$

Door de verstrooiingslengte die volgt uit deze T -matrix te matchen aan de verstrooiingslengte die volgt uit de paarveld EFT als gepresenteerd in ref. [2], kunnen we vervolgens vinden dat

$$g_2 = -4\mu\beta^2(2\pi)^3/\nu. \quad (4.24)$$

Deze relatie geeft het verband tussen de interactiesterkte in het twee-kanalen model met separabele interacties, en de contact interactie sterkte g_2 zoals gebruikt in de EFT. Met deze mapping tussen de modelparameters vinden we dus hoe het twee-kanalen model een goede voorstelling biedt voor de paarveld Lagrangiaan.

In het laatste gedeelte van deze sectie zullen we ons focussen op de inclusie van ‘effective range’ correcties. Om onze transitie matrix voor het verstrooiingsproces te kunnen schrijven als functie van de verstrooiingslengte kan de relatie tussen de T -matrix en de fasenverschuiving gebruikt worden, welke werd gegeven door vergelijking (3.39). Door deze vergelijking uit te schrijven in de ‘effective

range expansion' kan het het verband met de verstrooiingslengte en de effectieve range bepaald worden

$$-\frac{1}{4\pi^2\mu T(\mathbf{k}', \mathbf{k})} + ik = -\frac{1}{a} + \frac{1}{2}R_{\text{eff}}k^2 + \mathcal{O}(k^4). \quad (4.25)$$

Wanneer alleen de eerste orde term in rekening wordt gehouden dan vinden we dat

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{4\pi^2\mu} (ik + 1/a)^{-1} \\ &= \frac{1}{4\pi^2\mu} \left(\sqrt{2\mu(-Z) - i\varepsilon} + 1/a \right)^{-1}. \end{aligned} \quad (4.26)$$

De parameter Z stelt hierbij een energie voor van het drie-deeltjes systeem, welke in sectie (4.5) in meer detail uitgewerkt zal worden. Deze uitdrukking van de T -matrix kan ook uitgebreid worden met de effectieve range mee inbegrepen, wat resulteert in

$$T = \frac{1}{4\pi^2\mu} \left[\sqrt{2\mu(-Z) - i\varepsilon} + 1/a - R_{\text{eff}}(z + i\varepsilon) \right]^{-1}. \quad (4.27)$$

Dit stelt dus de transitie matrix voor van het verstrooiingsproces, welke later kan gebruikt worden in het berekenen van de verstrooiingsamplitude. In vergelijking met de EFT uitwerking met de contact interactie werd daar de complete paarveld propagator D berekend in de literatuur [2], welke in direct verband staat met de transitiematrix via $T = VDV$ (normaal gezien volgt uit de Lippmann-Schwinger vgl. dat $T = V + VGV$, maar zoals eerder vermeld kan de eerste term verwaarloosd worden). De uitdrukking die werd afgeleid was gelijk aan

$$\begin{aligned} D(E, P) &= \frac{4}{g_2} \left[1 + \frac{g_2}{4\pi^2} \left(\Lambda - \frac{\pi}{2} \sqrt{-Z - i\varepsilon} \right) \right]^{-1} \\ \Rightarrow g_2^2 D(E, P) &= 32\pi \left[\frac{1}{a} - \sqrt{-Z - i\varepsilon} \right]^{-1}, \end{aligned} \quad (4.28)$$

welke een gelijkaarde vorm heeft als onze T -matrix, maar met een minteken verschil voor de wortel¹.

4.4 Veelkanalen verstrooiingen

In deze sectie zal in het specifiek gekeken worden naar de verstrooiing van drie deeltjes met een mogelijke vorming van gebonden toestanden tussen twee van de drie deeltjes [12, 42, 44, 45, 47, 57]. Aangezien er drie deeltjes aanwezig zijn, kunnen er in dit scenario vier verschillende reacties gebeuren. In het bijzonder kunnen er drie mogelijke soorten moleculen gevormd worden, met telkens een verschillend deeltje dat vrij blijft, of er wordt geen molecuul gevormd en alle deeltjes blijven vrije deeltjes. Zoals ook al eerder vermeld in de voorgaande hoofdstukken worden deze verschillende mogelijke reacties, met elk een unieke finale toestand voor de drie deeltjes, de verschillende kanalen van de verstrooiingen genoemd. Aangezien er hier meerdere mogelijke kanalen beschikbaar zijn voor de deeltjes om in te wisselwerken, wordt dit een veelkanalen-verstrooiingsproces (= multichannel scattering) genoemd. Meer specifiek voor drie deeltjes die aangeduid worden met a , b en c , kan het

¹Voor de analyse van de vergelijking voor de diatoom propagator uit ref. [2] werd meermaals geprobeerd om deze te reproduceren. Hierbij werd echter wel telkens het resultaat verkregen met een plusteken voor de wortel, in plaats van het minteken dat in [2] werd uitgekomen.

(in)elastische scatteren van de deeltjes aangeduid worden met de kanalen

$$a + b + c = \begin{cases} a + b + c, & \text{kanaal 0} \\ bc + a, & \text{kanaal 1} \\ ca + b, & \text{kanaal 2} \\ ab + c, & \text{kanaal 3} \end{cases}$$

Om onderscheid te maken tussen de verschillende kanalen kunnen de vergelijkingen voor de één-kanaal verstrooiingen uitgebreid worden naar veelkanaal verstrooiingen door gebruik te maken van een extra index $\alpha = 0, 1, 2, 3$ welke de vier mogelijke kanalen van hierboven aanduidt. Merk dus op dat voor $\alpha = 1, 2, 3$ deze waarde altijd het deeltje voorstelt dat niet deelneemt aan de reactie.

Om de kwantummechanische beschrijving van het veelkanalen drie-deeltjes systeem te beschrijven kan eerst en vooral de Hamiltoniaan van dit systeem opgesteld worden. Veronderstel dat elk deeltje apart de standaard kinetische energie bezit en de deeltjes kunnen interageren met elkaar via een twee-deeltjes potentiaal. De Hamiltoniaan wordt dan gegeven door

$$H^{(3b)} = \frac{\mathbf{P}_a^2}{2m_a} + \frac{\mathbf{P}_b^2}{2m_b} + \frac{\mathbf{P}_c^2}{2m_c} + V_{ab}(\mathbf{r}_{ab}) + V_{ca}(\mathbf{r}_{ca}) + V_{bc}(\mathbf{r}_{bc}) \quad (4.29)$$

$$= H_0 + V_{ab}(\mathbf{r}_{ab}) + V_{ca}(\mathbf{r}_{ca}) + V_{bc}(\mathbf{r}_{bc}) \quad (4.30)$$

met $\mathbf{P}_i$ het momentum van deeltje i en $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ de relatieve afstand tussen deeltjes i en j . De bovenstaande Hamiltoniaan beschrijft het gehele drie-deeltjes systeem, maar het is echter ook mogelijk om de kanaal Hamiltonianen apart te definiëren. Stel bijvoorbeeld dat de deeltjes interageren via kanaal 1, waarbij deeltjes b en c dus een dimer vormen en deeltje a ongebonden blijft. De enige twee-deeltjes potentiaal die hier in deze verstrooiing van belang zal zijn is dan $V_{bc}(\mathbf{r}_{bc})$. Hetzelfde geldt voor de kanalen 2 en 3, waarbij alleen de potentiaal van belang is tussen de twee deeltjes in de gebonden toestand. Voor kanaal 0 zullen alleen de kinetische termen van belang zijn. Er geldt dus dat

$$\begin{aligned} \text{kanaal } \alpha = 0 : \quad H^0 &= \sum_{n=1}^3 \frac{\mathbf{P}_n^2}{2m_n}, \\ \text{kanaal } \alpha = 1, 2, 3 : \quad H^\alpha &= \sum_{n=1}^3 \frac{\mathbf{P}_n^2}{2m_n} + V_{ij}, \end{aligned}$$

waarvoor geldt dat $\alpha \neq i \neq j$ en $i, j = 1, 2, 3$. Naast de kanaal Hamiltonianen, definiëren we ook de volgende verstrooiingspotentiaal

$$V^\alpha = H^{(3b)} - H^\alpha. \quad (4.31)$$

Deze potentiaal bestaat dus uit de twee-deeltjes potentialen die niet voorkomen in de kanaal Hamiltoniaan H^α . Bijvoorbeeld voor H^1 wordt er een gebonden toestand gevormd tussen deeltjes b en c , en zal dus $V^\alpha = V_{ab} + V_{ca}$. Ook kan de Lippmann-Schwinger vergelijking uitgebreid worden naar het veelkanalen model. Deze wordt hierbij gegeven door [50]

$$|\psi, \alpha \pm\rangle = |k, \alpha\rangle + G^{(\pm)} V^\alpha |k, \alpha\rangle. \quad (4.32)$$

Hierbij stellen $|\psi, \alpha \pm\rangle$ de eigenfuncties voor van de totale Hamiltoniaan, terwijl $|k, \alpha\rangle$ eigenfuncties zijn van de Hamiltonianen van de verschillende kanalen H^α , en $G^\pm = (E - H^{(3b)} \pm i\varepsilon)^{-1}$. Deze uitdrukking kan ook geschreven worden in functie van de kanaal-specifieke Greense functie G^α . Net

zoals bij de twee-deeltjes verstrooiingen, waar de totale Greense functie kan geschreven worden als functie van de vrije Greense functie via $G^{(\pm)} = G_0^{(\pm)} + G_0^{(\pm)} V G^{(\pm)}$, kan hier een analoge versie gebruikt worden, namelijk

$$G^{(\pm)} = G^{(\alpha,\pm)} + G^{(\alpha,\pm)} V^\alpha G^{(\pm)}, \quad (4.33)$$

waarvoor geldt dat $G^{(\alpha,\pm)} = (E - H^\alpha \pm i\varepsilon)^{-1}$. Dit laat ons toe om de Lippmann-Schwinger vergelijking te herschrijven tot

$$\begin{aligned} |\psi, \alpha \pm\rangle &= |k, \alpha\rangle + \left[G^{(\beta,\pm)} + G^{(\beta,\pm)} V^\beta G^{(\pm)} \right] V^\alpha |k, \alpha\rangle \\ &= |k, \alpha\rangle + G^{(\beta,\pm)} U_1^{(\beta\alpha,\pm)} |k, \alpha\rangle. \end{aligned} \quad (4.34)$$

Hierin werd de drie-deeltjes transitie-matrix U_1 gedefinieerd, welke overeenkomt met het drie-deeltjes analoge van de T -matrix bij de twee-deeltjes verstrooiing. De $U^{(\beta\alpha)}$ -matrix beschrijft het verstrooiingsproces welke begint in kanaal α , en eindigt in kanaal β . Uit vgl. (4.34) volgt dat de transitie-matrix U_1 gedefinieerd is als

$$U_1^{(\beta\alpha,\pm)} = V^\alpha + V^\beta G^{(\pm)} V^\alpha \quad (4.35)$$

$$= V^\alpha + V^\beta G^{(\beta,\pm)} U_1^{(\beta\alpha,\pm)}. \quad (4.36)$$

Merk op dat deze uitdrukking niet symmetrisch is onder de verwisseling van de indices α en β . Echter bestaat er ook een andere vorm van de U -matrix met V^β in de eerste term i.p.v. V^α :

$$U_2^{(\beta\alpha,\pm)} = V^\beta + V^\beta G^{(\pm)} V^\alpha. \quad (4.37)$$

In het algemeen geldt dat deze twee definities voor de U -matrix niet aan elkaar gelijk zijn wanneer $H^\alpha \neq H^\beta$, maar beide uitdrukkingen leiden wel een equivalente beschrijving van het systeem. Echter kan er nog een meer algemene U -matrix gedefinieerd worden via

$$U^{\beta\alpha} = \left(1 - \delta^{\beta\alpha}\right) \left(G^{(\beta,\pm)}\right)^{-1} + U_1^{(\beta\alpha,\pm)} \quad (4.38)$$

$$= \left(1 - \delta^{\beta\alpha}\right) \left(G^{(\alpha,\pm)}\right)^{-1} + U_2^{(\beta\alpha,\pm)} \quad (4.39)$$

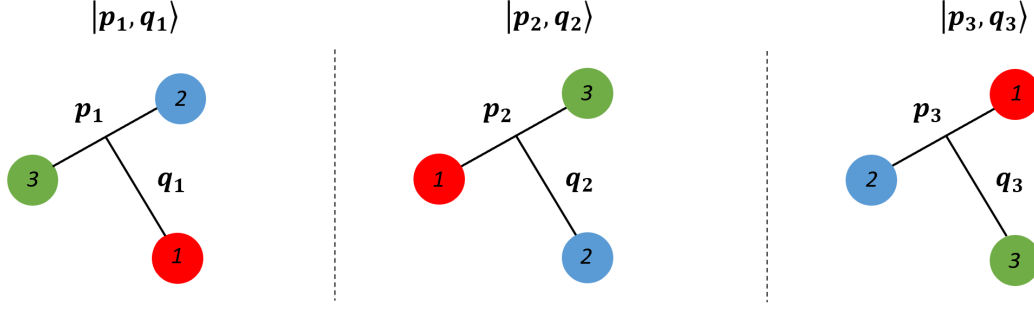
Deze twee uitdrukkingen worden de Faddeev vergelijkingen genoemd [55, 63]. Hiermee kunnen de Alt-Grassberger-Sandhas vergelijkingen (AGS-vergelijkingen) [64] voor de U -matrix geïntroduceerd worden:

$$U_{\alpha\beta} = (1 - \delta_{\alpha\beta}) G_0^{-1} + \sum_{\gamma=1}^3 T_\gamma G_0 U_{\gamma\beta}, \quad (4.40)$$

met $\gamma \neq \alpha$ en $\alpha, \beta = 0, 1, 2, 3$. Verder werden hier de vrije drie-deeltjes Greense functie $G_0 = (E - H_0 \pm i\varepsilon)^{-1}$ geïntroduceerd en de transitie-matrix $T_\alpha = V_{\beta\gamma} + V_{\beta\gamma} G_0 T_\alpha$, welke dus de verstrooiing voorstelt van deeltjes β en γ waarbij deeltje α vrij blijft.

4.5 Jacobi coördinaten systeem

Bij het analyseren van drie-deeltjes verstrooiingsprocessen met centrale potentialen, is het voordelig om te werken in termen van Jacobi coördinaten. Hiertoe introduceren we de momenta p_α en q_α [57, 65]. Bij het twee-deeltjes systeem was het nog mogelijk om het systeem te beschrijven met een relatief momentum tussen de twee deeltjes, maar vanaf er drie deeltjes zijn is er dus nood aan een extra momentum q . Equivalent aan de definitie in het twee-deeltjes probleem, beschrijft



Figuur 9: Grafische voorstelling van de drie verschillende sets Jacobi coördinaten.

het momentum p het relatieve momentum van twee interagerende deeltjes, terwijl q het relatieve momentum beschrijft van het derde deeltje t.o.v. deze twee deeltjes. Om deze relatieve momenta te relateren aan de één-deeltjes momenta, introduceren we eerst de relevante relatieve massa relaties in het drie-deeltjes systeem

$$\mu_{\beta\gamma,\alpha} = \frac{(m_\beta + m_\gamma)m_\alpha}{m_\alpha + m_\beta + m_\gamma}, \quad (4.41)$$

$$\mu_{\beta\gamma} = \frac{m_\beta m_\gamma}{m_\beta + m_\gamma}, \quad (4.42)$$

De drie sets van Jacobi coördinaten worden dan gegeven door

$$\mathbf{p}_\alpha = \mu_{\beta\gamma} \left(\frac{\mathbf{P}_\beta}{m_\beta} - \frac{\mathbf{P}_\gamma}{m_\gamma} \right) \quad (4.43)$$

$$\mathbf{q}_\alpha = \mu_{\beta\gamma,\alpha} \left[\frac{\mathbf{P}_\alpha}{m_\alpha} - \frac{\mathbf{P}_\beta + \mathbf{P}_\gamma}{m_\beta + m_\gamma} \right]. \quad (4.44)$$

Wanneer alleen deeltjes beschouwd worden met dezelfde massa's, $m_\alpha = m_\beta = m_\gamma = m$, dan worden deze vergelijkingen vereenvoudigd tot:

$$\mathbf{p}_\alpha = \frac{1}{2} (\mathbf{P}_\beta - \mathbf{P}_\gamma) \quad (4.45)$$

$$\mathbf{q}_\alpha = \frac{2}{3} \left[\mathbf{P}_\alpha - \frac{1}{2} (\mathbf{P}_\beta + \mathbf{P}_\gamma) \right]. \quad (4.46)$$

Deze coördinaten laten dus toe om het drie-deeltjes systeem te beschrijven met een van de toestanden $|\mathbf{p}_1, \mathbf{q}_1\rangle$, $|\mathbf{p}_2, \mathbf{q}_2\rangle$ of $|\mathbf{p}_3, \mathbf{q}_3\rangle$, welke alle drie een equivalente beschrijving van het systeem zullen geven. Daarom zal voortaan gekozen worden om $|\mathbf{q}, \mathbf{p}\rangle_\alpha = |\mathbf{q}, \mathbf{p}\rangle$ te gebruiken, waarbij verondersteld wordt dat $\langle \mathbf{q}, \mathbf{p} | \mathbf{q}', \mathbf{p}' \rangle = \delta(\mathbf{q}' - \mathbf{q}) \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p})$. Verder nog, de toestanden $|\mathbf{q}, \mathbf{p}\rangle_\alpha$ zijn eigenstoestanden van het vrije gedeelte van de Hamiltoniaan, H_0 . Dit wilt dus zeggen dat $H_0 |\mathbf{q}, \mathbf{p}\rangle_\alpha = E_0 |\mathbf{q}, \mathbf{p}\rangle_\alpha = [\mathbf{p}^2/(2\mu_{\beta\gamma}) + \mathbf{q}^2/(2\mu_{\beta\gamma,\alpha})] |\mathbf{q}, \mathbf{p}\rangle_\alpha$. In functies van de één-deeltjesmassa's wordt deze energie $E_0 = \mathbf{p}^2/m + 3\mathbf{q}^2/4m$. Verder verklaart dit ook de relatie tussen de twee-deeltjes transitie matrix T en de kanaal specifieke T_α matrix sinds deze laatste ook een twee-deeltjes verstrooiingsproces beschrijft, maar met een derde deeltje dat vrij blijft. Hierdoor kan afgeleid worden dat T_α equivalent is aan de T -matrix op een energie $Z = E - 3\mathbf{q}^2/4m$, waarbij we dus de energie van het derde deeltje moeten aftrekken van de totale energie. Dit is ook dezelfde energie Z die we al waren tegengekomen in sectie (4.3).

Het kan ook handig zijn om de oude ééndeeltjes-momenta te schrijven in functie van de nieuwe Jacobi momenta in de verschillende kanalen. Als voorbeeld zal hier kanaal $\alpha = 1$ beschouwd worden, maar de andere kanalen zijn volledig analoog. Voor kanaal 1 geldt dat:

$$\mathbf{p}_1 = \frac{1}{2}(\mathbf{P}_2 - \mathbf{P}_3) \quad (4.47)$$

$$\mathbf{q}_1 = \frac{2}{3} \left[\mathbf{P}_1 - \frac{1}{2}(\mathbf{P}_2 + \mathbf{P}_3) \right]. \quad (4.48)$$

Uit deze bovenstaande vergelijking kan een uitdrukking voor P_2 gehaald worden, welke verder kan ingevuld worden in de tweede vergelijking. Hieruit kan afgeleid worden dat $\mathbf{q}_1 = \frac{2}{3}(\mathbf{P}_1 - \mathbf{p}_1 - \mathbf{P}_3)$. Zo zijn er dus drie vergelijkingen afgeleid voor de ééndeeltjes-momenta:

$$\mathbf{P}_1 = \frac{3}{2}\mathbf{q}_1 + \mathbf{p}_1 + \mathbf{P}_3$$

$$\mathbf{P}_2 = 2\mathbf{p}_1 + \mathbf{P}_3$$

$$\mathbf{P}_3 = \mathbf{P}_3.$$

Wanneer verder nog in het massacentrum van de drie deeltjes wordt gewerkt, waarbij nog extra geldt dat $\mathbf{P}_1 + \mathbf{P}_2 + \mathbf{P}_3 = 0$, dan kunnen met deze vier vergelijkingen de uitdrukkingen voor de ééndeeltjesmomenta bepaald worden als functie van de Jacobi coördinaten. Deze zijn dan:

$$\mathbf{P}_1 = \mathbf{q}_1 \quad (4.49)$$

$$\mathbf{P}_2 = \mathbf{p}_1 - \frac{1}{2}\mathbf{q}_1 \quad (4.50)$$

$$\mathbf{P}_3 = -\frac{1}{2}\mathbf{q}_1 - \mathbf{p}_1. \quad (4.51)$$

Voor kanalen 2 en 3 kan op een volledig analoge manier ook deze momenta bepaald worden als functie van hun Jacobi coördinaten. Deze resultaten staan samengevat in de tabel hieronder.

Jacobi coördinaten	$\mathbf{P}_1$	$\mathbf{P}_2$	$\mathbf{P}_3$
$ \mathbf{p}_1, \mathbf{q}_1\rangle$	$\mathbf{q}_1$	$\mathbf{p}_1 - \frac{1}{2}\mathbf{q}_1$	$-\frac{1}{2}\mathbf{q}_1 - \mathbf{p}_1$
$ \mathbf{p}_2, \mathbf{q}_2\rangle$	$-\frac{1}{2}\mathbf{q}_2 - \mathbf{p}_2$	$\mathbf{q}_2$	$\mathbf{p}_2 - \frac{1}{2}\mathbf{q}_2$
$ \mathbf{p}_3, \mathbf{q}_3\rangle$	$\mathbf{p}_3 - \frac{1}{2}\mathbf{q}_3$	$-\frac{1}{2}\mathbf{q}_3 - \mathbf{p}_3$	$\mathbf{q}_3$

Tabel 1: Ééndeeltjes momenta in het massacentrum van de drie deeltjes voor de verschillende Jacobi coördinaten.

Deze drie verschillende Jacobi coördinaten zijn alle drie equivalent aan elkaar. De coördinaten kunnen in elkaar omgezet, wat kan afgeleid worden door bijvoorbeeld te kijken naar het verschil tussen $|\mathbf{p}_1, \mathbf{q}_1\rangle$ en $|\mathbf{p}_2, \mathbf{q}_2\rangle$. Uit bovenstaande tabel kan afgelezen worden dat door de substitutie $\mathbf{q}_1 \rightarrow -\mathbf{q}_2/2 - \mathbf{p}_2$ de momenta voor $\mathbf{P}_1$ al overeenkomen. Voor $\mathbf{P}_2$ en $\mathbf{P}_3$ te doen matchen kan dan verder afgeleid worden dat $\mathbf{p}_1 \rightarrow -\mathbf{p}_2/2 + 3\mathbf{q}_2/4$. Voor de relatie tussen de Jacobi coördinaten van kanaal 1 naar kanaal 3 kan hetzelfde worden gedaan en daarbij kan bepaald worden dat $\mathbf{q}_1 \rightarrow \mathbf{p}_3 - \mathbf{q}_3/2$ en $\mathbf{p}_1 \rightarrow -3\mathbf{q}_3/4 - \mathbf{p}_3/2$.

4.6 Drie-deeltjes transitiematrix

Ook kan er een uitdrukking bepaald worden voor de drie-deeltjes gebonden toestanden, startend van de Schrödinger vergelijking $H^{3b}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$ [12, 44]. Met behulp van de vrije Greense functie

kan deze vergelijking verder herschreven worden tot

$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha=1}^3 G_0 V_\alpha |\Psi\rangle \quad (4.52)$$

$$= - \sum_{\alpha=1}^3 G_0 |\Phi_\alpha\rangle, \quad (4.53)$$

waarbij de Faddeev componenten $|\Phi_\alpha\rangle = -V_\alpha |\Psi\rangle$ werden geïntroduceerd. Wanneer verder ook nog de substitutie $\psi_\alpha = G_0 V_\alpha \Psi = -G_0 \Phi_\alpha$ wordt gemaakt, dan kan verder geschreven worden dat $\Psi = \sum_{\alpha=1}^3 \psi_\alpha$. Wanneer we deze notatie gebruiken, dan kan uit vergelijking (4.52) afgeleid worden dat

$$(1 - G_0 V_\alpha) \psi_\alpha = G_0 V_\alpha \sum_{i \neq \alpha} \psi_i \quad (4.54)$$

$$\Rightarrow \psi_\alpha = G_0 T_\alpha \sum_{i \neq \alpha} \psi_i, \quad (4.55)$$

waarbij de substitutie $T_\alpha = (1 - V_\alpha G_0)^{-1} V_\alpha$ werd gemaakt. Met behulp van de permutatie operatoren P_+ en P_- , waarvoor geldt dat $P_+ \psi_i = \psi_{i+1}$ en $P_- \psi_i = \psi_{i-1}$, kan deze vergelijking voor ψ geschreven worden als een functie van zichzelf via

$$\psi_\alpha = G_0 T_\alpha (P_+ + P_-) \psi_\alpha. \quad (4.56)$$

Deze vergelijking wordt ook de Faddeev vergelijking genoemd voor de drie-deeltjes gebonden toestanden. Echter is het nu ook mogelijk om via de AGS vergelijkingen een betere versie $\bar{U}$ van de U -matrix te definiëren voor identieke deeltjes. Uit de AGS vergelijkingen, zie vgl. (4.40), volgt dat

$$U_{\alpha 0} = G_0^{-1} + \sum_{\gamma=1}^3 T_\gamma G_0 U_{\gamma 0}, \quad (4.57)$$

met $\gamma \neq \alpha$ en $\alpha = 1, 2, 3$. Deze sommatie kan ook geschreven worden met de permutatie operatoren via $P = P_+ + P_-$,

$$\begin{aligned} U_{\alpha 0} &= G_0^{-1} + (P_+ + P_-) T_\gamma G_0 U_{\gamma 0} \\ &= G_0^{-1} + P T_\gamma G_0 U_{\gamma 0}. \end{aligned} \quad (4.58)$$

Wanneer we dan definiëren dat $\bar{U}_{\alpha 0} = T_\alpha G_0 U_{\alpha 0} (1 + P)$, dan zien we dat hier uit volgt dat

$$\bar{U}_{\alpha 0} = T_\alpha (1 + P) + T_\alpha G_0 P \bar{U}_{\alpha 0}. \quad (4.59)$$

Uit vergelijking (4.40) kan verder ook bepaald worden dat

$$U_{00} = \sum_{\gamma=1}^3 T_\gamma G_0 U_{\gamma 0}, \quad (4.60)$$

waaruit dan met de vorige vergelijking kan afgeleid worden dat

$$U_{00} (1 + P) = \sum_{\alpha=1}^3 \bar{U}_{\alpha 0}, \quad (4.61)$$

en waaruit volgt dat [66]

$$\langle \mathbf{p}, \mathbf{q} | U_{00} | \mathbf{p}', \mathbf{q}' \rangle = \frac{1}{3} \sum_{\alpha=1}^3 \langle \mathbf{p}_{\alpha}, \mathbf{q}_{\alpha} | \bar{U}_{\alpha 0} | \mathbf{p}', \mathbf{q}' \rangle. \quad (4.62)$$

In het volgende hoofdstuk zal het doel erin bestaan om deze U -matrix in alle detail uit te gaan werken en te vergelijken met de effectieve veldentheorie met de contact interacties.

5 Drie-Deeltjes Verstrooiingsamplitude

In dit hoofdstuk zal de drie-deeltjes transitie-matrix zoals geïntroduceerd in het vorige hoofdstuk geanalyseerd worden in de momentum ruimte. Vervolgens zal deze matrix gerelateerd worden aan het drie-deeltjes scattering amplitude en zal deze vergeleken worden met de oplossing zoals verkregen uit de effectieve veldentheorie gepresenteerd in ref. [2]. We beginnen onze analyse met de drie-deeltjes transitie-matrix zoals gegeven in vgl. (4.59), en zal deze, net zoals het ook al eerder gedaan werd, geprojecteerd worden op de momentum ruimte. Herinner dat deze U -matrix bestaat uit twee verschillende termen, waarbij de eerste term alleen de pure twee deeltjes interacties beschrijft, en de tweede term de paarsgewijze interactie van drie deeltjes. Deze twee termen beschrijven dus allebei twee interacties tussen drie deeltjes, echter bij de eerste term is het derde deeltje niet betrokken in de interactie en propageert deze enkel mee als spectator deeltje. Daarom zal later de eerste term niet meer mee in beschouwing worden genomen, omdat we alleen het fysische proces van de paarsgewijze drie-deeltjes interacties willen bekijken. Wanneer we dit doen, dan houden we dus alleen nog het geconnecteerde gedeelte van de diagrammen of dus de U -matrix over

$$\bar{U}_{\alpha 0}^{(con)} = T_{\alpha} G_0 P \bar{U}_{\alpha 0} \quad (5.1)$$

$$= T_{\alpha} G_0 P T_{\alpha} (1 + P) + T_{\alpha} G_0 P T_{\alpha} G_0 P \bar{U}_{\alpha 0}. \quad (5.2)$$

Van de twee-deeltjes T -matrix en van de vrije Greense functie is al gekend hoe deze eruit zien in momentum ruimte uit de vorige hoofdstukken, maar van de permutatie operator nog niet. Dit kan echter bepaald worden met de waarden in tabel 1. Opdat de drie Jacobi basiskets uiteindelijk een equivalente beschrijving van het systeem bieden, werd in sectie (4.5) een relatie afgeleid tussen de momenta om te kunnen wisselen van $|\mathbf{p}_1, \mathbf{q}_1\rangle$ naar $|\mathbf{p}_2, \mathbf{q}_2\rangle$ of $|\mathbf{p}_3, \mathbf{q}_3\rangle$. We kunnen de relaties tussen de Jacobi basisvectoren in de volgende compacte vorm noteren

$$\mathbf{p}_i = \frac{3}{4}\mathbf{q}_{i+1} - \frac{1}{2}\mathbf{p}_{i+1} = -\frac{3}{4}\mathbf{q}_{i-1} - \frac{1}{2}\mathbf{p}_{i-1} \quad (5.3)$$

$$\mathbf{q}_i = -\mathbf{p}_{i+1} - \frac{1}{2}\mathbf{q}_{i+1} = \mathbf{p}_{i-1} - \frac{1}{2}\mathbf{q}_{i-1}, \quad (5.4)$$

waarbij de indices cyclisch doorlopen, zodanig dat $i + 1$ en $i - 1$ modulo 3 worden genomen. Dit houdt dus in dat voor $i = 1$, er $i - 1 = 3$ wordt gekozen, en voor $i = 3$ er $i + 1 = 1$ wordt genomen. Met deze relaties tussen de verschillende Jacobi momenta kan de actie van de permutatie operator op deze toestanden bepaald worden. Meer specifiek wordt deze dan

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p}_j, \mathbf{q}_j | P | \mathbf{p}_i, \mathbf{q}_i \rangle &= \langle \mathbf{p}_j, \mathbf{q}_j | (P_+ + P_-) | \mathbf{p}_i, \mathbf{q}_i \rangle \\ &= \langle \mathbf{p}_j, \mathbf{q}_j | \mathbf{p}_{i+1}, \mathbf{q}_{i+1} \rangle + \langle \mathbf{p}_j, \mathbf{q}_j | \mathbf{p}_{i-1}, \mathbf{q}_{i-1} \rangle \\ &= \langle \mathbf{p}_j, \mathbf{q}_j | -\frac{3}{4}\mathbf{q}_i - \frac{1}{2}\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_i - \frac{1}{2}\mathbf{q}_i \rangle + \langle \mathbf{p}_j, \mathbf{q}_j | \frac{3}{4}\mathbf{q}_i - \frac{1}{2}\mathbf{p}_i, -\mathbf{p}_i - \frac{1}{2}\mathbf{q}_i \rangle. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Herinner dat de Jacobi toestanden een orthonormale basis vormen, waardoor dit verder uitgewerkt kan worden tot

$$\langle \mathbf{p}_j, \mathbf{q}_j | P | \mathbf{p}_i, \mathbf{q}_i \rangle = \delta \left(\mathbf{p}_j + \frac{3}{4}\mathbf{q}_i + \frac{1}{2}\mathbf{p}_i \right) \delta \left(\mathbf{q}_j - \mathbf{p}_i + \frac{1}{2}\mathbf{q}_i \right) + \delta \left(\mathbf{p}_j - \frac{3}{4}\mathbf{q}_i + \frac{1}{2}\mathbf{p}_i \right) \delta \left(\mathbf{q}_j + \mathbf{p}_i + \frac{1}{2}\mathbf{q}_i \right) \quad (5.6)$$

$$= \delta \left(\mathbf{p}_j + \frac{1}{2}\mathbf{q}_j + \mathbf{q}_i \right) \delta \left(\mathbf{q}_j - \mathbf{p}_i + \frac{1}{2}\mathbf{q}_i \right) + \delta \left(\mathbf{p}_j - \frac{1}{2}\mathbf{q}_j - \mathbf{q}_i \right) \delta \left(\mathbf{q}_j + \mathbf{p}_i + \frac{1}{2}\mathbf{q}_i \right). \quad (5.7)$$

De actie van de permutatie operator vereenvoudigd in momentum ruimte dus tot twee termen met twee delta functies. Nu dat we weten hoe alle operatoren eruitzien in de impulsbasis kan de projectie van de U matrix bepaald worden, zie ook vgl. (4.59):

$$\langle \mathbf{p}_j, \mathbf{q}_j | \bar{U}_{\alpha 0} | \mathbf{p}_i, \mathbf{q}_i \rangle = \langle \mathbf{p}_j, \mathbf{q}_j | T_\alpha (1 + P) + T_\alpha G_0 P T_\alpha (1 + P) + T_\alpha G_0 P T_\alpha G_0 P T_\alpha (1 + P) + \dots | \mathbf{p}_i, \mathbf{q}_i \rangle. \quad (5.8)$$

Nu kunnen de drie operatoren T_α , G_0 en P inwerken op de momenta waar ze tussen staan. Voor T_α wordt alleen de twee-deeltjes verstrooiing bekeken, waarbij het derde deeltje vrij blijft, en daarmee kan dit dus geschreven worden als

$$\langle \mathbf{p}_j, \mathbf{q}_j | T_\alpha | \mathbf{p}_k, \mathbf{q}_k \rangle = \delta(\mathbf{q}_j - \mathbf{q}_k) \langle \mathbf{p}_j, | T_\alpha | \mathbf{p}_k, \rangle. \quad (5.9)$$

Om de vrije Greense functie in momentum ruimte uit te schrijven, kan gebruik gemaakt worden van het feit dat de Jacobi kets basiskets zijn van de vrije Hamiltoniaan H_0 . Net zoals in de sectie over Jacobi coördinaten al werd aangehaald, hebben deze toestanden een eigenenergie van $E_0(p, q) = \mathbf{p}^2/m + 3\mathbf{q}^2/4m$. Zo wordt de projectie van de vrije Greense functie op de momentum basis dus gegeven door

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p}_k, \mathbf{q}_k | G_0 | \mathbf{p}_l, \mathbf{q}_l \rangle &= \left\langle \mathbf{p}_k, \mathbf{q}_k \left| \frac{1}{E - E_0(p, q) + i\varepsilon} \right| \mathbf{p}_l, \mathbf{q}_l \right\rangle \\ &= \frac{\delta(\mathbf{q}_k - \mathbf{q}_l) \delta(\mathbf{p}_k - \mathbf{p}_l)}{E - \mathbf{p}_l^2/m - 3\mathbf{q}_l^2/4m + i\varepsilon}. \end{aligned} \quad (5.10)$$

In het verdere verloop van de sectie zal een uitdrukking gezocht worden voor de actie van U_{00} in de momentum basis. Hierbij maken we gebruik van vgl. (4.62) om U_{00} direct te relateren aan $\bar{U}_{\alpha 0}$. Om onze analyse overzichtelijk te houden, zullen we de momentum-ruimte analyse van de drie termen uitgeschreven in het rechterlid van vgl. (5.8) apart beschouwen.

Beginnende bij de eerste term, waar we de volgende uitdrukking dienen op te lossen

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p}, \mathbf{q} | U_{00}^{(term1)} | \mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0 \rangle &= \frac{1}{3} \sum_{\alpha=1}^3 \langle \mathbf{p}_\alpha, \mathbf{q}_\alpha | \bar{U}_{\alpha 0}^{(term1)} | \mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0 \rangle \\ &= \frac{1}{3} \sum_{\alpha=1}^3 \langle \mathbf{p}_\alpha, \mathbf{q}_\alpha | T_\alpha(Z) (1 + P) | \mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0 \rangle \\ &= \frac{1}{3} \sum_{\alpha=1}^3 (\langle \mathbf{p}_\alpha, \mathbf{q}_\alpha | T_\alpha(Z) | \mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0 \rangle + \langle \mathbf{p}_\alpha, \mathbf{q}_\alpha | T_\alpha(Z) P | \mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0 \rangle). \end{aligned} \quad (5.11)$$

De transitie matrix T_α geeft een beschrijving van een twee-deeltjes verstrooiing waarbij het derde deeltje toekijkt. Dit is echter gewoon gelijk aan de twee-deeltjes transitie matrix $T(Z) = \tau(Z) |\xi\rangle \langle \xi|$ op een energie $Z_q = E - 3q^2/4m$, zoals in meer detail besproken in sec. (4.5). De actie van de permutatie operator op de momentum basis werd ook al hierboven uitgewerkt. Om de notaties in wat volgt niet te complex te maken wordt er een nieuwe, verkorte notatie ingevoerd volgens $\mathbf{P}_0^i = \{\mathbf{p}_0, P_+ \mathbf{p}_0, P_- \mathbf{p}_0\} = \{\mathbf{p}_0, -\frac{3}{4}\mathbf{q}_0 - \frac{1}{2}\mathbf{p}_0, \frac{3}{4}\mathbf{q}_0 - \frac{1}{2}\mathbf{p}_0\}$, met dus $i = 1, 2, 3$. Voor q kan hetzelfde gedaan worden, $\mathbf{Q}_0^i = \{\mathbf{q}_0, P_+ \mathbf{q}_0, P_- \mathbf{q}_0\} = \{\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0 - \frac{1}{2}\mathbf{q}_0, -\mathbf{p}_0 - \frac{1}{2}\mathbf{q}_0\}$. Dus samengevat worden de

nieuwe momenta P_0^i en Q_0^i gegeven door

$$\begin{aligned}
 \mathbf{P}_0^1 &= \mathbf{p}_0 \\
 \mathbf{P}_0^2 &= -\frac{3}{4}\mathbf{q}_0 - \frac{1}{2}\mathbf{p}_0 \\
 \mathbf{P}_0^3 &= \frac{3}{4}\mathbf{q}_0 - \frac{1}{2}\mathbf{p}_0 \\
 \mathbf{Q}_0^1 &= \mathbf{q}_0 \\
 \mathbf{Q}_0^2 &= \mathbf{p}_0 - \frac{1}{2}\mathbf{q}_0 \\
 \mathbf{Q}_0^3 &= -\mathbf{p}_0 - \frac{1}{2}\mathbf{q}_0.
 \end{aligned} \tag{5.12}$$

De eerste term van de U -matrix kan dan verder uitgewerkt worden tot

$$\langle \mathbf{p}, \mathbf{q} | U_{00}^{(term 1)} | \mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0 \rangle = \frac{1}{3} \sum_{\alpha=1}^3 (\delta(\mathbf{q}_\alpha - \mathbf{q}_0) \langle \mathbf{p}_\alpha | T_\alpha(Z) | \mathbf{p}_0 \rangle + \langle \mathbf{p}_\alpha, \mathbf{q}_\alpha | T_\alpha(Z) P | \mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0 \rangle) \tag{5.13}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{3} \sum_{\alpha=1}^3 (\delta(\mathbf{q}_\alpha - \mathbf{Q}_0^1) \langle \mathbf{p}_\alpha | T_\alpha(Z) | \mathbf{P}_0^1 \rangle + \langle \mathbf{p}_\alpha, \mathbf{q}_\alpha | T_\alpha(Z) | \mathbf{P}^2, \mathbf{Q}_0^2 \rangle \\
 &\quad + \langle \mathbf{p}_\alpha, \mathbf{q}_\alpha | T_\alpha(Z) | \mathbf{P}_0^3, \mathbf{Q}_0^3 \rangle)
 \end{aligned} \tag{5.14}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{3} \sum_{\alpha=1}^3 (\delta(\mathbf{q}_\alpha - \mathbf{Q}_0^1) \langle \mathbf{p}_\alpha | T_\alpha(Z) | \mathbf{P}_0^1 \rangle + \delta(\mathbf{q}_\alpha - \mathbf{Q}_0^2) \langle \mathbf{p}_\alpha | T_\alpha(Z) | \mathbf{P}_0^2 \rangle \\
 &\quad + \delta(\mathbf{q}_\alpha - \mathbf{Q}_0^3) \langle \mathbf{p}_\alpha | T_\alpha(Z) | \mathbf{P}_0^3 \rangle).
 \end{aligned} \tag{5.15}$$

Hierin kan een sommatie over i herkend worden:

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{p}, \mathbf{q} | U_{00}^{(term 1)} | \mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0 \rangle &= \frac{1}{3} \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{i=1}^3 \delta(\mathbf{q}_\alpha - \mathbf{Q}_0^i) \langle \mathbf{p}_\alpha | T_\alpha(Z) | \mathbf{P}_0^i \rangle \\
 &= \frac{1}{3} \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{i=1}^3 \tau(Z_{Q_0^i}) \xi(p_\alpha) \xi(P_0^i) \delta(\mathbf{q}_\alpha - \mathbf{Q}_0^i).
 \end{aligned} \tag{5.16}$$

Deze drie-dimensionale delta functie kan omgeschreven worden naar een één-dimensionele delta functie over de groottes van de Jacobi momenta. Hiermee vinden we dan als oplossing:

$$\boxed{\langle \mathbf{p}, \mathbf{q} | U_{00}^{(term 1)} | \mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0 \rangle = \frac{1}{3} \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{i=1}^3 \tau(Z_{Q_0^i}) \xi(p_\alpha) \xi(P_0^i) \frac{\delta(|\mathbf{q}_\alpha - \mathbf{Q}_0^i|)}{4\pi q_\alpha^2}}. \tag{5.17}$$

Voor de tweede term in het rechterlid van vgl. (5.8) kan een soortgelijke analyse uitgevoerd worden. De exacte term die berekend moet worden is:

$$\langle \mathbf{p}, \mathbf{q} | U_{00}^{(term 2)} | \mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0 \rangle = \frac{1}{3} \sum_{\alpha=1}^3 \langle \mathbf{p}_\alpha, \mathbf{q}_\alpha | T_\alpha(Z) G_0 P T_\alpha(Z) (1 + P) | \mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0 \rangle. \tag{5.18}$$

Om dit product van operatoren uit te kunnen rekenen kunnen hier twee Jacobi identiteitsbasissen tussengevoegd worden:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p}, \mathbf{q} | U_{00}^{(term 2)} | \mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0 \rangle &= \frac{1}{3} \sum_{\alpha=1}^3 \int d\mathbf{q}' d\mathbf{p}' d\mathbf{q}'' d\mathbf{p}'' \langle \mathbf{p}_\alpha, \mathbf{q}_\alpha | T_\alpha(Z) | \mathbf{p}', \mathbf{q}' \rangle \langle \mathbf{p}', \mathbf{q}' | G_0 P | \mathbf{p}'', \mathbf{q}'' \rangle \\ &\times \langle \mathbf{p}'', \mathbf{q}'' | T_\alpha(Z) (1 + P) | \mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0 \rangle. \end{aligned} \quad (5.19)$$

Deze laatste bracket is terug dezelfde bracket als degene die werd uitgerekend voor de eerste term uit de U -matrix. Daar werd $\langle \mathbf{p}_\alpha, \mathbf{q}_\alpha | T_\alpha(Z) (1 + P) | \mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0 \rangle$ bepaald, dus de oplossing, zoals gegeven in vergelijking (5.17), kan gewoon hier ingevuld worden met de substitutie $\mathbf{p}_\alpha, \mathbf{q}_\alpha \rightarrow \mathbf{p}'', \mathbf{q}''$. Hiermee evalueert vgl. (5.19) tot

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p}, \mathbf{q} | U_{00}^{(term 2)} | \mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0 \rangle &= \frac{1}{3} \sum_{\alpha=1}^3 \int d\mathbf{q}' d\mathbf{p}' d\mathbf{q}'' d\mathbf{p}'' \langle \mathbf{p}_\alpha, \mathbf{q}_\alpha | T_\alpha(Z) | \mathbf{p}', \mathbf{q}' \rangle \langle \mathbf{p}', \mathbf{q}' | G_0 P | \mathbf{p}'', \mathbf{q}'' \rangle \\ &\times \sum_{i=1}^3 \tau(Z_{Q_0^i}) \xi(p'') \xi(P_0^i) \frac{\delta(|\mathbf{q}'' - \mathbf{Q}_0^i|)}{4\pi q''^2}. \end{aligned} \quad (5.20)$$

De bracket van de T_α matrix kan nu verder uitgeschreven worden en de permutatie operator kan ook inwerken op de Jacobi ket, zodat we vinden dat:

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{3} \sum_{\alpha=1}^3 \int d\mathbf{q}' d\mathbf{p}' d\mathbf{q}'' d\mathbf{p}'' \delta(\mathbf{q}_\alpha - \mathbf{q}') \tau(Z_{q_\alpha}) \xi(p_\alpha) \xi(p') \times \sum_{i=1}^3 \tau(Z_{Q_0^i}) \xi(p'') \xi(P_0^i) \frac{\delta(|\mathbf{q}'' - \mathbf{Q}_0^i|)}{4\pi q''^2} \\ &\times \left[\langle \mathbf{p}', \mathbf{q}' | G_0 | -\frac{3}{4}\mathbf{q}'' - \frac{1}{2}\mathbf{p}'', \mathbf{p}'' - \frac{1}{2}\mathbf{q}'' \rangle + \langle \mathbf{p}', \mathbf{q}' | G_0 | \frac{3}{4}\mathbf{q}'' - \frac{1}{2}\mathbf{p}'', -\mathbf{p}'' - \frac{1}{2}\mathbf{q}'' \rangle \right]. \end{aligned} \quad (5.21)$$

Vervolgens leidt het uitwerken van de Greense functies tot:

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{3} \sum_{\alpha=1}^3 \int d\mathbf{q}' d\mathbf{p}' d\mathbf{q}'' d\mathbf{p}'' \delta(\mathbf{q}_\alpha - \mathbf{q}') \tau(Z_{q_\alpha}) \xi(p_\alpha) \xi(p') \times \sum_{i=1}^3 \tau(Z_{Q_0^i}) \xi(p'') \xi(P_0^i) \frac{\delta(|\mathbf{q}'' - \mathbf{Q}_0^i|)}{4\pi q''^2} \\ &\times \left[\frac{\delta(\mathbf{p}' + \frac{3}{4}\mathbf{q}'' + \frac{1}{2}\mathbf{p}'') \delta(\mathbf{q}' - \mathbf{p}'' + \frac{1}{2}\mathbf{q}'')}{E - E(-\frac{3}{4}\mathbf{q}'' - \frac{1}{2}\mathbf{p}'', \mathbf{p}'' - \frac{1}{2}\mathbf{q}'')} + \frac{\delta(\mathbf{p}' - \frac{3}{4}\mathbf{q}'' + \frac{1}{2}\mathbf{p}'') \delta(\mathbf{q}' + \mathbf{p}'' + \frac{1}{2}\mathbf{q}'')}{E - E(\frac{3}{4}\mathbf{q}'' - \frac{1}{2}\mathbf{p}'', -\mathbf{p}'' - \frac{1}{2}\mathbf{q}'')} \right]. \end{aligned} \quad (5.22)$$

De momenta invullen in de noemers van de Greense functies leidt dan tot twee keer dezelfde noemer,

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{3} \sum_{\alpha=1}^3 \int d\mathbf{q}' d\mathbf{p}' d\mathbf{q}'' d\mathbf{p}'' \delta(\mathbf{q}_\alpha - \mathbf{q}') \tau(Z_{q_\alpha}) \xi(p_\alpha) \xi(p') \times \sum_{i=1}^3 \tau(Z_{Q_0^i}) \xi(p'') \xi(P_0^i) \frac{\delta(|\mathbf{q}'' - \mathbf{Q}_0^i|)}{4\pi q''^2} \\ &\times \left[\frac{\delta(\mathbf{p}' + \frac{3}{4}\mathbf{q}'' + \frac{1}{2}\mathbf{p}'') \delta(\mathbf{q}' - \mathbf{p}'' + \frac{1}{2}\mathbf{q}'')}{E - \frac{1}{m}(\mathbf{p}''^2 + \frac{3}{4}\mathbf{q}''^2)} + \frac{\delta(\mathbf{p}' - \frac{3}{4}\mathbf{q}'' + \frac{1}{2}\mathbf{p}'') \delta(\mathbf{q}' + \mathbf{p}'' + \frac{1}{2}\mathbf{q}'')}{E - \frac{1}{m}(\mathbf{p}''^2 + \frac{3}{4}\mathbf{q}''^2)} \right]. \end{aligned} \quad (5.23)$$

Deze twee termen hebben nu een zelfde noemer, maar wel een verschillende tellers met andere delta functies. Echter zullen deze twee term toch uitkomen op hetzelfde resultaat op het einde. Dit is een gevolg van de keuze van de vorm van de separabele potentiaal. Aangezien de vormfactoren die behoren tot onze potentiaal enkel afhangen van de grootte van de momenta (en niet de richtingen), zal het uitwerken van de delta functies in vgl. (5.23) leiden tot eenzelfde waarde van de vorm factoren voor beide termen. Er kan dus gewoon een van deze twee Greense functies overgehouden

worden, maar met een extra $\times 2$ factor. Hier zal verder gewerkt worden met de eerste term. Met het uitwerken van de delta functies van de Greense functies in vgl. (5.23) vereenvoudigt deze uitdrukking nu tot

$$= \frac{1}{3} \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{i=1}^3 \int d\mathbf{q}'' d\mathbf{p}'' \delta \left(\mathbf{q}_\alpha - \mathbf{p}'' + \frac{1}{2} \mathbf{q}'' \right) \tau(Z_{q_\alpha}) \xi(p_\alpha) \xi \left(\left| -\frac{3}{4} \mathbf{q}'' - \frac{1}{2} \mathbf{p}'' \right| \right) \tau(Z_{Q_0^i}) \xi(p'') \xi(P_0^i) \\ \times \frac{\delta(|\mathbf{q}'' - \mathbf{Q}_0^i|)}{4\pi q''^2} \frac{2}{E - (\mathbf{p}''^2 + \frac{3}{4} \mathbf{q}''^2) / m}. \quad (5.24)$$

Tot slot kan de integraal over $\mathbf{p}''$ nog opgelost worden met de eerste delta functie in het rechterlid van vgl. (5.24), zodat $\mathbf{p}'' = \mathbf{q}_\alpha + \mathbf{q}''/2$. Ook kunnen de mintekens uit de vormfactor weggelaten worden aangezien er toch een absolute waarde wordt genomen:

$$= \frac{1}{3} \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{i=1}^3 \int d\mathbf{q}'' \tau(Z_{q_\alpha}) \xi(p_\alpha) \xi \left(\left| \mathbf{q}'' + \frac{1}{2} \mathbf{q}_\alpha \right| \right) \tau(Z_{Q_0^i}) \xi \left(\left| \mathbf{q}_\alpha + \frac{1}{2} \mathbf{q}'' \right| \right) \xi(P_0^i) \frac{\delta(|\mathbf{q}'' - \mathbf{Q}_0^i|)}{4\pi q''^2} \\ \times \frac{2}{E - (q_\alpha^2 + \mathbf{q}_\alpha \cdot \mathbf{q}'' + q''^2) / m}. \quad (5.25)$$

Als allerlaatste stap kan ook de integraal over de grootte van $\mathbf{q}''$ opgelost worden met de laatste delta functie. Hierdoor vinden we dan dat

$$= \frac{1}{3} \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{i=1}^3 \int d\hat{\mathbf{Q}}_0^i \tau(Z_{q_\alpha}) \xi(p_\alpha) \xi \left(\left| \mathbf{Q}_0^i + \frac{1}{2} \mathbf{q}_\alpha \right| \right) \tau(Z_{Q_0^i}) \xi \left(\left| \mathbf{q}_\alpha + \frac{1}{2} \mathbf{Q}_0^i \right| \right) \xi(P_0^i) \frac{2\pi}{4\pi} \\ \times \frac{2}{E - (q_\alpha^2 + \mathbf{q}_\alpha \cdot \mathbf{Q}_0^i + Q_0^i{}^2) / m}, \quad (5.26)$$

met de integraal over $d\hat{\mathbf{Q}}_0^i = d(\cos \theta)$. Dit kan ook geschreven worden als

$$\left\langle \mathbf{p}, \mathbf{q} \left| U_{00}^{(term 2)} \right| \mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0 \right\rangle = \frac{1}{2} \times \frac{1}{3} \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{i=1}^3 \tau(Z_{q_\alpha}) \xi(p_\alpha) \tau(Z_{Q_0^i}) \xi(P_0^i) 2U_1(E, \mathbf{q}_\alpha, \mathbf{Q}_0^i) \quad (5.27)$$

waarbij we U_1 definiëren via

$$U_1(E, \mathbf{q}_\alpha, \mathbf{Q}_0^i) = \int d\hat{\mathbf{Q}}_0^i \xi \left(\left| \mathbf{Q}_0^i + \frac{1}{2} \mathbf{q}_\alpha \right| \right) \xi \left(\left| \mathbf{q}_\alpha + \frac{1}{2} \mathbf{Q}_0^i \right| \right) \frac{1}{E - (q_\alpha^2 + \mathbf{q}_\alpha \cdot \mathbf{Q}_0^i + Q_0^i{}^2) / m}. \quad (5.28)$$

Tot slot kan ook nog gekeken worden naar de derde term in de expansie van de U -matrix zoals gegeven in vgl. (5.8). Aangezien deze term ook weer een combinatie is van operatoren die ook verschijnen in de eerste en tweede term, kan deze ook geschreven worden met behulp van U_1 zoals hierboven gedefinieerd. De term die bepaald moet worden is

$$\left\langle \mathbf{p}, \mathbf{q} \left| U_{00}^{(term 3)} \right| \mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0 \right\rangle = \frac{1}{3} \sum_{\alpha=1}^3 \langle \mathbf{p}_\alpha, \mathbf{q}_\alpha | T_\alpha(Z) G_0 P T_\alpha(Z) G_0 P T_\alpha(Z) (1 + P) | \mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0 \rangle. \quad (5.29)$$

Hier moeten vier Jacobi basissen tussengevoegd worden, wat leidt tot de volgende uitdrukking,

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{3} \sum_{\alpha=1}^3 \int d\mathbf{q}' d\mathbf{p}' d\mathbf{q}'' d\mathbf{p}'' d\mathbf{q}''' d\mathbf{p}''' d\mathbf{q}'''' d\mathbf{p}'''' \delta(\mathbf{q}_\alpha - \mathbf{q}') \tau(Z_{q_\alpha}) \xi(p_\alpha) \xi(p') \langle \mathbf{p}', \mathbf{q}' | G_0 P | \mathbf{p}'', \mathbf{q}'' \rangle \\
 &\times \delta(\mathbf{q}'' - \mathbf{q}''') \tau(Z_{q''}) \xi(p'') \xi(p''') \langle \mathbf{p}''', \mathbf{q}''' | G_0 P | \mathbf{p}'''' , \mathbf{q}'''' \rangle \sum_{i=1}^3 \tau(Z_{Q_0^i}) \xi(p''') \xi(P_0^i) \frac{\delta(|\mathbf{q}'''' - \mathbf{Q}_0^i|)}{4\pi q''''^2}.
 \end{aligned} \tag{5.30}$$

De projectie van $G_0 P$ op de momentum basis werd voor de tweede term al in alle detail uitgewerkt, dus dat resultaat kan hier ook ingevuld worden. Hierdoor verdwijnen de integralen over $\mathbf{q}'$ en $\mathbf{p}'$ doordat de Greense functies twee delta functies geven voor $\mathbf{q}' = \mathbf{p}'' - \mathbf{q}''/2$ en $\mathbf{p}' = -\mathbf{p}''/2 - 3\mathbf{q}''/4$. Dit resulteert dan in

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{3} \sum_{\alpha=1}^3 \int d\mathbf{q}'' d\mathbf{p}'' d\mathbf{q}''' d\mathbf{p}''' d\mathbf{q}'''' d\mathbf{p}'''' \delta\left(\mathbf{q}_\alpha - \mathbf{p}'' + \frac{1}{2}\mathbf{q}''\right) \tau(Z_{q_\alpha}) \xi(p_\alpha) \xi\left(\left|-\frac{1}{2}\mathbf{p}'' - \frac{3}{4}\mathbf{q}''\right|\right) \\
 &\times \frac{2}{E - \frac{1}{m}(p''^2 + \frac{3}{4}q''^2)} \delta(\mathbf{q}'' - \mathbf{q}''') \tau(Z_{q''}) \xi(p'') \xi(p''') \langle \mathbf{p}''', \mathbf{q}''' | G_0 P | \mathbf{p}'''' , \mathbf{q}'''' \rangle \\
 &\times \sum_{i=1}^3 \tau(Z_{Q_0^i}) \xi(p''') \xi(P_0^i) \frac{\delta(|\mathbf{q}'''' - \mathbf{Q}_0^i|)}{4\pi q''''^2}.
 \end{aligned} \tag{5.31}$$

Voor de tweede Greense functie kan hetzelfde gedaan worden waardoor de integralen over $\mathbf{q}'''$ en $\mathbf{p}'''$ verdwijnen:

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{3} \sum_{\alpha=1}^3 \int d\mathbf{q}'' d\mathbf{p}'' d\mathbf{q}'''' d\mathbf{p}'''' \delta\left(\mathbf{q}_\alpha - \mathbf{p}'' + \frac{1}{2}\mathbf{q}''\right) \tau(Z_{q_\alpha}) \xi(p_\alpha) \xi\left(\left|-\frac{1}{2}\mathbf{p}'' - \frac{3}{4}\mathbf{q}''\right|\right) \frac{2}{E - \frac{1}{m}(p''^2 + \frac{3}{4}q''^2)} \\
 &\times \delta\left(\mathbf{q}'' - \mathbf{p}'''' + \frac{1}{2}\mathbf{q}''''\right) \tau(Z_{q''}) \xi(p'') \xi\left(\left|-\frac{1}{2}\mathbf{p}'''' - \frac{3}{4}\mathbf{q}''''\right|\right) \frac{2}{E - \frac{1}{m}(p''''^2 + \frac{3}{4}q''''^2)} \\
 &\times \sum_{i=1}^3 \tau(Z_{Q_0^i}) \xi(p''') \xi(P_0^i) \frac{\delta(|\mathbf{q}'''' - \mathbf{Q}_0^i|)}{4\pi q''''^2}.
 \end{aligned} \tag{5.32}$$

Nu kunnen de integralen over $\mathbf{p}''$ en $\mathbf{p}''''$ nog opgelost worden met de twee overblijvende delta functies:

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{3} \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{i=1}^3 \int d\mathbf{q}'' d\mathbf{q}'''' \tau(Z_{q_\alpha}) \xi(p_\alpha) \xi\left(\left|-\frac{1}{2}\mathbf{q}_\alpha - \mathbf{q}''\right|\right) \frac{2}{E - (q_\alpha^2 + \mathbf{q}_\alpha \cdot \mathbf{q}'' + q''^2)/m} \\
 &\times \tau(Z_{q''}) \xi\left(\left|\mathbf{q}_\alpha + \frac{1}{2}\mathbf{q}''\right|\right) \xi\left(\left|-\frac{1}{2}\mathbf{q}'' - \mathbf{q}''''\right|\right) \frac{2}{E - (q''^2 + \mathbf{q}'' \cdot \mathbf{q}'''' + q''''^2)/m} \\
 &\times \tau(Z_{Q_0^i}) \xi\left(\left|\frac{1}{2}\mathbf{q}'' + \mathbf{q}''''\right|\right) \xi(P_0^i) \frac{\delta(|\mathbf{q}'''' - \mathbf{Q}_0^i|)}{4\pi q''''^2}.
 \end{aligned} \tag{5.33}$$

Ook de laatste delta functie kan uitgewerkt worden en de mintekens weglaten uit de vormfactoren,

zodat:

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{3} \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{i=1}^3 \int d\mathbf{q}'' d\hat{\mathbf{Q}}_0^i \tau(Z_{q_\alpha}) \xi(p_\alpha) \xi\left(\left|\frac{1}{2}\mathbf{q}_\alpha + \mathbf{q}''\right|\right) \frac{2}{E - (q_\alpha^2 + \mathbf{q}_\alpha \cdot \mathbf{q}'' + q''^2)/m} \\
 &\times \tau(Z_{q''}) \xi\left(\left|\mathbf{q}_\alpha + \frac{1}{2}\mathbf{q}''\right|\right) \xi\left(\left|\frac{1}{2}\mathbf{q}'' + \mathbf{Q}_0^i\right|\right) \frac{2}{E - (q''^2 + \mathbf{q}'' \cdot \mathbf{Q}_0^i + Q_0^{i2})/m} \\
 &\times \tau(Z_{Q_0^i}) \xi\left(\left|\frac{1}{2}\mathbf{q}'' + \mathbf{Q}_0^i\right|\right) \xi(P_0^i) \frac{1}{2}.
 \end{aligned} \tag{5.34}$$

Deze termen kunnen wat gehergroepeerd worden opdat er wat meer overzicht komt over de verschillende factoren. Verder kan $d\mathbf{q}'' = 2\pi q''^2 dq'' d\hat{\mathbf{q}}''$ geschreven worden. De derde term wordt dan gegeven door:

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{p}, \mathbf{q} | U_{00}^{(term\ 3)} | \mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0 \rangle &= \frac{1}{3} \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{i=1}^3 \tau(Z_{Q_0^i}) \xi(P_0^i) \xi(p_\alpha) \tau(Z_{q_\alpha}) \int dq'' \tau(Z_{q''}) \frac{q''^2}{2} 2\pi \\
 &\times \int d\hat{\mathbf{q}}'' \frac{2}{E - (q_\alpha^2 + \mathbf{q}_\alpha \cdot \mathbf{q}'' + q''^2)/m} \xi\left(\left|\frac{1}{2}\mathbf{q}_\alpha + \mathbf{q}''\right|\right) \xi\left(\left|\mathbf{q}_\alpha + \frac{1}{2}\mathbf{q}''\right|\right) \\
 &\times \int d\hat{\mathbf{Q}}_0^i \frac{2}{E - (q''^2 + \mathbf{q}'' \cdot \mathbf{Q}_0^i + Q_0^{i2})/m} \xi\left(\left|\frac{1}{2}\mathbf{q}'' + \mathbf{Q}_0^i\right|\right) \xi\left(\left|\frac{1}{2}\mathbf{q}'' + \mathbf{Q}_0^i\right|\right)
 \end{aligned} \tag{5.35}$$

$$\tag{5.36}$$

Hierin kan twee keer de uitdrukking voor U_1 herkend worden, zie vgl. (5.28), zodat we uiteindelijk kunnen concluderen dat

$$\langle \mathbf{p}, \mathbf{q} | U_{00}^{(term\ 3)} | \mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0 \rangle = \frac{8\pi}{6} \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{i=1}^3 \tau(Z_{Q_0^i}) \xi(P_0^i) \xi(p_\alpha) \tau(Z_{q_\alpha}) \int dq'' U_1(E, \mathbf{q}_\alpha, \mathbf{q}'') \tau(Z_{q''}) U_1(E, \mathbf{q}'', \mathbf{Q}_0^i) q''^2$$

Nu we alle drie de termen in het rechterlid van vgl. (5.8) bepaald hebben, kunnen we ze weer samenzetten en de hele reeks afleiden. De som van deze drie termen wordt gegeven door:

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{p}, \mathbf{q} | U_{00} | \mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0 \rangle &= \frac{1}{3} \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{i=1}^3 \tau(Z_{Q_0^i}) \xi(P_0^i) \xi(p_\alpha) \left(\frac{\delta(|\mathbf{q}_\alpha - \mathbf{Q}_0^i|)}{4\pi q_\alpha^2} + \tau(Z_{q_\alpha}) \frac{1}{2} \left[2U_1(E, \mathbf{q}_\alpha, \mathbf{Q}_0^i) \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + 8\pi \int dq'' U_1(E, \mathbf{q}_\alpha, \mathbf{q}'') \tau(Z_{q''}) U_1(E, \mathbf{q}'', \mathbf{Q}_0^i) q''^2 + \dots \right] \right).
 \end{aligned} \tag{5.37}$$

Tot slot wordt de verstrooiingsamplitude A nog gedefinieerd via

$$A(E, q_\alpha, Q_0^i) = U_1(E, \mathbf{q}_\alpha, \mathbf{Q}_0^i) + 4\pi \int dq'' U_1(E, \mathbf{q}_\alpha, \mathbf{q}'') \tau(Z_{q''}) A(E, \mathbf{q}'', \mathbf{Q}_0^i) q''^2. \tag{5.38}$$

Hierbij hebben we gebruik gemaakt van het iteratieve karakter van de termen in de Born expansie van de U -matrix om de volledige scattering amplitude als integraalvergelijking te definiëren. Zo vinden we de volgende uiteindelijke compacte vorm voor de drie-deeltjes transitie matrix U_{00} :

$$\langle \mathbf{p}, \mathbf{q} | U_{00} | \mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0 \rangle = \frac{1}{3} \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{i=1}^3 \tau(Z_{Q_0^i}) \xi(P_0^i) \xi(p_\alpha) \left(\frac{\delta(|\mathbf{q}_\alpha - \mathbf{Q}_0^i|)}{4\pi q_\alpha^2} + \tau(Z_{q_\alpha}) A(E, q_\alpha, Q_0^i) \right)$$

Deze eerste term in de U -matrix beschrijft hier alleen het verstrooiingsproces waarbij twee deeltjes interageren, en het derde deeltje als spectator aanwezig is. Dit deel van de U -matrix zal dus niet bijdragen aan de drie-deeltjes scattering amplitude zoals geïntroduceerd in hoofdstuk 4, welke alleen afhangt van de geconnecteerde gedeelten van de drie-deeltjes transitie matrix. Om de vergelijking met de verstrooiingsamplitude te faciliteren, introduceren we een nieuwe grootheid $\mathcal{U}_{00}$, welke alleen de geconnecteerde bijdragen aan de drie-deeltjes transitie matrix bevat en hiermee kan worden geschreven als

$$\langle \mathbf{p}, \mathbf{q} | \mathcal{U}_{00} | \mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0 \rangle = \frac{1}{3} \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{i=1}^3 \tau \left(Z_{Q_0^i} \right) \xi \left(P_0^i \right) \xi(p_\alpha) \tau \left(Z_{q_\alpha} \right) A \left(E, q_\alpha, Q_0^i \right). \quad (5.39)$$

Het expliciet invullen van de vergelijking van de verstrooiingsamplitude zoals gegeven in vgl. (5.38) geeft vervolgens

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p}, \mathbf{q} | \mathcal{U}_{00} | \mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0 \rangle &= \frac{1}{3} \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{i=1}^3 \tau \left(Z_{Q_0^i} \right) \xi \left(P_0^i \right) \xi(p_\alpha) \tau \left(Z_{q_\alpha} \right) \\ &\times \left[\int d\hat{\mathbf{Q}}_0^i \xi \left(\left| \mathbf{Q}_0^i + \frac{1}{2} \mathbf{q}_\alpha \right| \right) \xi \left(\left| \mathbf{q}_\alpha + \frac{1}{2} \mathbf{Q}_0^i \right| \right) \frac{1}{E - (q_\alpha^2 + \mathbf{q}_\alpha \cdot \mathbf{Q}_0^i + Q_0^i{}^2) / m} \right. \\ &\left. + 4\pi \int d\mathbf{q}'' \xi \left(\left| \frac{1}{2} \mathbf{q}'' + \mathbf{q}_\alpha \right| \right) \xi \left(\left| \frac{1}{2} \mathbf{q}'' + \mathbf{q}_\alpha \right| \right) \frac{\tau \left(Z_{q''} \right) A \left(E, \mathbf{q}'', \mathbf{Q}_0^i \right)}{E - (q''^2 + \mathbf{q}'' \cdot \mathbf{q}_\alpha + q_\alpha^2) / m} \right]. \end{aligned} \quad (5.40)$$

In de laatste regel van de voorgaande vergelijking kan de factor $\tau \left(Z_{q''} \right)$ nog ingevuld worden. Zoals uitgewerkt in sectie (4.3), komt deze factor overeen met de waarde $\tau \left(Z_{q''} \right) = 1/(2\pi^2) \times (1/a + \sqrt{-E + 3q''^2/4 - i\varepsilon})^{-1}$, met $m = 1$ verondersteld. Dit ook invullen geeft

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p}, \mathbf{q} | \mathcal{U}_{00} | \mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0 \rangle &= -\frac{1}{3} \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{i=1}^3 \tau \left(Z_{Q_0^i} \right) \xi \left(P_0^i \right) \xi(p_\alpha) \tau \left(Z_{q_\alpha} \right) \\ &\times \left[\int d\hat{\mathbf{Q}}_0^i \xi \left(\left| \mathbf{Q}_0^i + \frac{1}{2} \mathbf{q}_\alpha \right| \right) \xi \left(\left| \mathbf{q}_\alpha + \frac{1}{2} \mathbf{Q}_0^i \right| \right) \frac{1}{q_\alpha^2 + \mathbf{q}_\alpha \cdot \mathbf{Q}_0^i + Q_0^i{}^2 - E} \right. \\ &\left. + 4\pi \int d\mathbf{q}'' \frac{\xi \left(\left| \frac{1}{2} \mathbf{q}'' + \mathbf{q}_\alpha \right| \right) \xi \left(\left| \frac{1}{2} \mathbf{q}'' + \mathbf{q}_\alpha \right| \right)}{1/a + \sqrt{-E + 3q''^2/4 - i\varepsilon}} \frac{1}{2\pi^2} \frac{A \left(E, \mathbf{q}'', \mathbf{Q}_0^i \right)}{q''^2 + \mathbf{q}'' \cdot \mathbf{q}_\alpha + q_\alpha^2 - E} \right]. \end{aligned} \quad (5.41)$$

Voor de uiteindelijke vergelijking met de amplitude die volgt uit de EFT is het voordelig om de vormfactoren te herschrijven als $\xi \left(\left| \mathbf{Q}_0^i + \frac{1}{2} \mathbf{q}_\alpha \right| \right) \xi \left(\left| \mathbf{q}_\alpha + \frac{1}{2} \mathbf{Q}_0^i \right| \right) = 1 + [\xi \left(\left| \mathbf{Q}_0^i + \frac{1}{2} \mathbf{q}_\alpha \right| \right) \xi \left(\left| \mathbf{q}_\alpha + \frac{1}{2} \mathbf{Q}_0^i \right| \right) - 1]$, zodat we de bovenstaande vergelijking alternatief kunnen schrijven als

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p}, \mathbf{q} | \mathcal{U}_{00} | \mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0 \rangle &= -\frac{1}{3} \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{i=1}^3 \tau \left(Z_{Q_0^i} \right) \xi \left(P_0^i \right) \xi(p_\alpha) \tau \left(Z_{q_\alpha} \right) \\ &\times \left[\int d\hat{\mathbf{Q}}_0^i \frac{1}{q_\alpha^2 + \mathbf{q}_\alpha \cdot \mathbf{Q}_0^i + Q_0^i{}^2 - E} + \int d\hat{\mathbf{Q}}_0^i \frac{\xi \left(\left| \mathbf{Q}_0^i + \frac{1}{2} \mathbf{q}_\alpha \right| \right) \xi \left(\left| \mathbf{q}_\alpha + \frac{1}{2} \mathbf{Q}_0^i \right| \right) - 1}{q_\alpha^2 + \mathbf{q}_\alpha \cdot \mathbf{Q}_0^i + Q_0^i{}^2 - E} \right. \\ &+ \frac{2}{\pi} \int d\mathbf{q}'' q''^2 \left(\int d\hat{\mathbf{q}}'' \frac{1}{q''^2 + \mathbf{q}'' \cdot \mathbf{q}_\alpha + q_\alpha^2 - E} + \int d\hat{\mathbf{q}}'' \frac{\xi \left(\left| \frac{1}{2} \mathbf{q}'' + \mathbf{q}_\alpha \right| \right) \xi \left(\left| \frac{1}{2} \mathbf{q}'' + \mathbf{q}_\alpha \right| \right) - 1}{q''^2 + \mathbf{q}'' \cdot \mathbf{q}_\alpha + q_\alpha^2 - E} \right) \\ &\left. \times \frac{A \left(E, \mathbf{q}'', \mathbf{Q}_0^i \right)}{1/a + \sqrt{-E + 3q''^2/4 - i\varepsilon}} \right]. \end{aligned} \quad (5.42)$$

De integralen over het angulaire gedeelte met een 1 in de teller hebben een eenduidige bekende oplossing. Het invullen van deze oplossing geeft

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{p}, \mathbf{q} | \mathcal{U}_{00} | \mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0 \rangle = & -\frac{1}{3} \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{i=1}^3 \tau(Z_{Q_0^i}) \xi(P_0^i) \xi(p_\alpha) \tau(Z_{q_\alpha}) \\
 & \times \left[\frac{1}{q_\alpha Q_0^i} \ln \left(\frac{q_\alpha^2 + q_\alpha Q_0^i + Q_0^{i2} - E}{q_\alpha^2 - q_\alpha Q_0^i + Q_0^{i2} - E} \right) + \int d\hat{\mathbf{Q}}^i \frac{\xi(|\mathbf{Q}_0^i + \frac{1}{2}\mathbf{q}_\alpha|) \xi(|\mathbf{q}_\alpha + \frac{1}{2}\mathbf{Q}_0^i|) - 1}{q_\alpha^2 + \mathbf{q}_\alpha \cdot \mathbf{Q}_0^i + Q_0^{i2} - E} \right. \\
 & + \frac{2}{\pi} \int dq'' q''^2 \left(\frac{1}{q_\alpha q''} \ln \left(\frac{q_\alpha^2 + q_\alpha q'' + q''^2 - E}{q_\alpha^2 - q_\alpha q'' + q''^2 - E} \right) + \int d\hat{\mathbf{q}}'' \frac{\xi(|\frac{1}{2}\mathbf{q}'' + \mathbf{q}_\alpha|) \xi(|\frac{1}{2}\mathbf{q}'' + \mathbf{q}_\alpha|) - 1}{q''^2 + \mathbf{q}'' \cdot \mathbf{q}_\alpha + q_\alpha^2 - E} \right) \\
 & \left. \times \frac{A(E, \mathbf{q}'', \mathbf{Q}_0^i)}{1/a + \sqrt{-E + 3q''^2/4 - i\varepsilon}} \right]. \tag{5.43}
 \end{aligned}$$

Herinner dat de vormfactor $\xi(p)$ overeenkomt met een stapfunctie $\Theta(p - \Lambda)$. Als gevolg van de aanwezigheid van meerdere momenta in de vormfactoren, kunnen we niet direct stellen dat de waarden van de momentum integralen automatisch nul zullen zijn voor momenta groter dan Λ . De combinatie van twee momenta, hoewel wellicht apart groter dan Λ , kan namelijk afhankelijk van de richting van de vectoren optellen tot een totaal magnitude dat kleiner is dan de cutoff Λ en leiden tot een eindige waarde van het scattering amplitude. De numerieke analyse van de scattering amplitude vereist echter uiteraard een eindige bovengrens voor de momentum integraal. We hebben hiertoe numeriek geverifieerd dat de vormfactoren in vgl. (5.43) geen bijdrage meer leveren aan de transitie matrix voor momenta die groter zijn dan 2Λ . Deze resultaten van de numerieke analyse zullen worden besproken in sec. (5.4).

Tot slot kan dit ook nog in een kortere notatie geschreven worden waarbij nog een nieuwe verstrooiingsamplitude $\mathcal{A}$ ingevoerd wordt. De $\mathcal{U}$ -matrix kan dan geschreven worden als functie van de verstrooiingsamplitude via

$$\langle \mathbf{p}, \mathbf{q} | \mathcal{U}_{00} | \mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0 \rangle = -\frac{1}{3} \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{i=1}^3 \frac{4}{g_2^2} \tau(Z_{Q_0^i}) \xi(P_0^i) \xi(p_\alpha) \tau(Z_{q_\alpha}) \mathcal{A}(E, \mathbf{q}_\alpha, \mathbf{Q}_0^i), \tag{5.44}$$

met

$$\begin{aligned}
 \int_{-1}^{+1} dx \mathcal{A}(E, \mathbf{q}_\alpha, \mathbf{Q}_0^i) = & \frac{g_2^2}{4} \left[\int d\hat{\mathbf{Q}}_0^i \frac{1}{q_\alpha^2 + \mathbf{q}_\alpha \cdot \mathbf{Q}_0^i + Q_0^{i2} - E} + \int d\hat{\mathbf{Q}}_0^i \frac{\xi(|\mathbf{Q}_0^i + \frac{1}{2}\mathbf{q}_\alpha|) \xi(|\mathbf{q}_\alpha + \frac{1}{2}\mathbf{Q}_0^i|) - 1}{q_\alpha^2 + \mathbf{q}_\alpha \cdot \mathbf{Q}_0^i + Q_0^{i2} - E} \right] \\
 & + \frac{2}{\pi} \int_0^{+\infty} dq'' q''^2 \left(\int d\hat{\mathbf{q}}'' \frac{1}{q''^2 + \mathbf{q}'' \cdot \mathbf{q}_\alpha + q_\alpha^2 - E} + \int d\hat{\mathbf{q}}'' \frac{\xi(|\frac{1}{2}\mathbf{q}'' + \mathbf{q}_\alpha|) \xi(|\frac{1}{2}\mathbf{q}'' + \mathbf{q}_\alpha|) - 1}{q''^2 + \mathbf{q}'' \cdot \mathbf{q}_\alpha + q_\alpha^2 - E} \right) \\
 & \times \frac{\int_{-1}^{+1} dx \mathcal{A}(E, \mathbf{q}'', \mathbf{Q}_0^i)}{1/a + \sqrt{-E + 3q''^2/4 - i\varepsilon}}, \tag{5.45}
 \end{aligned}$$

en met $x = \cos \theta$. Het scattering amplitude $\mathcal{A}$ is hetzelfde als $4/g_2^2 A$. Door de term $4/g_2^2$ te absorberen in het verstrooiingsamplitude, komt de vormfactor $4/g_2^2 \tau(Z) \tau(Z)$ in vgl. (5.44) nu overeen met de diatoom propagator in het bijzijn van een derde deeltje *voor* de drie-deeltjes scattering, en dezelfde propagator *na* de drie-deeltjes scattering. Hiermee komt het scattering amplitude $\mathcal{A}$ nu dus effectief overeen met het *geamputeerde* gedeelte van de geconnecteerde transitie matrix. Wanneer in bovenstaande vergelijking $\mathcal{A}_s$ gedefinieerd wordt als de hoekintegraal $\int_{-1}^{+1} dx \mathcal{A}$ dan wordt de

uiteindelijke uitdrukking voor de verstrooiingsamplitude gegeven door

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_s(E, \mathbf{q}_\alpha, \mathbf{Q}_0^i) &= \frac{g_2^2}{4} \left[\frac{1}{q_\alpha Q_0^i} \ln \left(\frac{q_\alpha^2 + q_\alpha Q_0^i + Q_0^{i2} - E}{q_\alpha^2 - q_\alpha Q_0^i + Q_0^{i2} - E} \right) + \int d\hat{\mathbf{Q}}_0^i \frac{\xi(|\mathbf{Q}_0^i + \frac{1}{2}\mathbf{q}_\alpha|) \xi(|\mathbf{q}_\alpha + \frac{1}{2}\mathbf{Q}_0^i|) - 1}{q_\alpha^2 + \mathbf{q}_\alpha \cdot \mathbf{Q}_0^i + Q_0^{i2} - E} \right] \\ &+ \frac{2}{\pi} \int_0^{+\infty} dq'' q''^2 \left(\frac{1}{q_\alpha q''} \ln \left(\frac{q_\alpha^2 + q_\alpha q'' + q''^2 - E}{q_\alpha^2 - q_\alpha q'' + q''^2 - E} \right) + \int d\hat{\mathbf{q}}'' \frac{\xi(|\frac{1}{2}\mathbf{q}'' + \mathbf{q}_\alpha|) \xi(|\frac{1}{2}\mathbf{q}'' + \mathbf{q}_\alpha|) - 1}{q''^2 + \mathbf{q}'' \cdot \mathbf{q}_\alpha + q_\alpha^2 - E} \right) \\ &\times \frac{\mathcal{A}_s(E, \mathbf{q}'', \mathbf{Q}_0^i)}{1/a - R_{\text{eff}}(E - 3q''^2/4)/2 + \sqrt{-E + 3q''^2/4 - i\varepsilon}}. \end{aligned} \quad (5.46)$$

waarbij nu ook ter volledigheid de effectieve range R_{eff} mee in rekening is gebracht. In ref. [2] wordt de verstrooiingsamplitude herschaald met een residu factor $Z_D/2 = (64\pi/(ag_2^2))/2$. Om onze uiteindelijke vergelijking met de EFT zoals gepresenteerd in Ref. [2] dus te faciliteren, zullen wij ook een herschaalde versie van $\mathcal{A}_s$ gebruiken door te vermenigvuldigen met deze factor Z_D . Verder kunnen ook onze momenta hernoemd worden om een directe analogie te krijgen. Hiervoor wordt doorgevoerd dat $q'' \rightarrow q$, $Q_0^i \rightarrow k$ en $q_\alpha \rightarrow p$. Dit levert dan de volgende uitdrukking op

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_s(E, \mathbf{p}, \mathbf{k}) &= \frac{16\pi}{a} \left[\frac{1}{2pk} \ln \left(\frac{p^2 + pk + k^2 - E}{p^2 - pk + k^2 - E} \right) + \frac{1}{2} \int d\hat{\mathbf{k}} \frac{\xi(|\mathbf{k} + \frac{1}{2}\mathbf{p}|) \xi(|\mathbf{p} + \frac{1}{2}\mathbf{k}|) - 1}{p^2 + \mathbf{p} \cdot \mathbf{k} + k^2 - E} \right] \\ &+ \frac{4}{\pi} \int_0^{+\infty} dq q^2 \left(\frac{1}{2pq} \ln \left(\frac{p^2 + pq + q^2 - E}{p^2 - pq + q^2 - E} \right) + \frac{1}{2} \int d\hat{\mathbf{q}} \frac{\xi(|\frac{1}{2}\mathbf{q} + \mathbf{p}|) \xi(|\frac{1}{2}\mathbf{q} + \mathbf{p}|) - 1}{q^2 + \mathbf{q} \cdot \mathbf{p} + p^2 - E} \right) \\ &\times \frac{\mathcal{A}_s(E, \mathbf{q}, \mathbf{k})}{1/a - R_{\text{eff}}(E - 3q^2/4)/2 + \sqrt{-E + 3q^2/4 - i\varepsilon}}. \end{aligned} \quad (5.47)$$

5.1 Regimes van de verstrooiingsamplitude

De hoekafhankelijke integralen in de uitdrukking van onze scattering amplitude kunnen nu ook verder opgelost worden. Echter zullen er twee verschillende oplossingen bestaan wanneer $k > p$ of $q > p$, of andersom. De oplossingen van deze integraal werden in ref. [62] bepaald en worden hier verder uitgewerkt in termen van onze Jacobi momenta p, q en de cutoff Λ . Aangezien de twee hoekintegralen in vgl. (5.46) hetzelfde zijn op de verschillende argumenten in de vorm factoren na, zullen beide integralen analoge oplossingen hebben. Het volstaat dus om enkel de volgende integraal te analyseren

$$H(E, p, q) = \int_{-1}^{+1} dx \frac{\xi(q + \frac{p}{2})\xi(p + \frac{q}{2})}{p^2 + q^2 + pqx - E}. \quad (5.48)$$

Zoals hierboven vermeld heeft deze integraal een oplossing $H^{(1)}$ voor $q < p$ en een oplossing $H^{(2)}$ voor $q > p$. Voor het gebied $H^{(1)}$ zal de momentum integraal begrensd worden door de vormfactor $\xi(|p + q/2|)$. Voor de stapfunctie vormfactor die wordt gebruikt in onze analyse, vinden we dus effectief de voorwaarde dat $p^2 + q^2/4 + pqx/2 < \Lambda^2$ opdat de integraal niet gelijk is aan nul. Afhankelijk van de grootte van p en q volgt hieruit dan een maximale integratie hoek x_{max} waarvoor de integraal $H^{(1)}$ eindig blijft. De waarden voor zowel $x_{\text{max}}^{(1)}$ als $x_{\text{max}}^{(2)}$ worden gegeven door:

$$x_{\text{max}}^{(1)} = \frac{\Lambda^2 - p^2 - \frac{1}{4}q^2}{qp} \quad (5.49)$$

$$x_{\text{max}}^{(2)} = \frac{\Lambda^2 - \frac{1}{4}p^2 - q^2}{qp}. \quad (5.50)$$

We kunnen nu voor zowel $H^{(1)}$ als $H^{(2)}$ drie verschillende oplossingen vinden als functie van de waarden van $x_{max}^{(1,2)}$. Voor $q \leq p$ vinden we dat:

$$H^{(1)}(E, p, q) = \begin{cases} 0 & x_{max}^{(1)} < -1 \\ \frac{1}{pq} \ln \left(\frac{\frac{3}{4}q^2 + \Lambda^2 - E}{p^2 + q^2 - pq - E} \right) & -1 < x_{max}^{(1)} < 1 \\ \frac{1}{pq} \ln \left(\frac{p^2 + q^2 + pq - E}{p^2 + q^2 - pq - E} \right) & x_{max}^{(1)} > 1 \end{cases} \quad (5.51)$$

En voor $q > p$:

$$H^{(2)}(E, p, q) = \begin{cases} 0 & x_{max}^{(2)} < -1 \\ \frac{1}{pq} \ln \left(\frac{\frac{3}{4}p^2 + \Lambda^2 - E}{p^2 + q^2 - pq - E} \right) & -1 < x_{max}^{(2)} < 1 \\ \frac{1}{pq} \ln \left(\frac{p^2 + q^2 + pq - E}{p^2 + q^2 - pq - E} \right) & x_{max}^{(2)} > 1 \end{cases} \quad (5.52)$$

Met de oplossingen van de hoekintegralen nu gekend, kunnen we de uiteindelijke uitdrukking voor de verstrooiingsamplitude $\mathcal{A}_s$ in de volgende compacte vorm schrijven

$$\mathcal{A}_s(E, p, k) = \frac{8\pi}{a} H(E, p, k) + \frac{2}{\pi} \int dq q^2 \frac{H(E, p, q) \mathcal{A}_s(E, q, k)}{1/a + \sqrt{-E + 3q^2/4}} \quad (5.53)$$

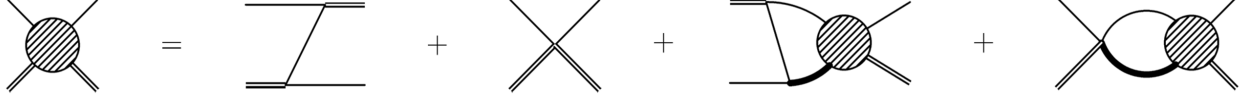
5.2 Vergelijking met de contact interactie

Nu onze uitdrukking voor de verstrooiingsamplitude helemaal gekend is kan dit vergeleken worden met de contact interactie. De Greense functie die volgt uit de EFT met twee- en drie-deeltjes contact interacties wordt uitvoerig besproken in ref. [2]. In deze sectie zullen we de belangrijkste stappen van de analyse van de Greense functie kort samenvatten. Herinner dat de truc met het paarveld zoals uitvoerig besproken in sectie (4.1) ons toeliet om de Lagrangiaan met effectieve drie-deeltjes interacties te schrijven als

$$\mathcal{L} = \psi^\dagger \left(i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2} \nabla^2 \right) \psi + \frac{g_2}{4} d^\dagger d - \frac{g_2}{4} \left(d^\dagger \psi^2 + \psi^{\dagger 2} d \right) - \frac{g_3}{36} d^\dagger d \psi^\dagger \psi. \quad (5.54)$$

Nu om de verstrooiingsamplitude te bepalen kan op dezelfde manier aan de slag gegaan worden als bij het twee-deeltjes probleem. Zoals in sec. (3.1), wordt de drie-deeltjes verstrooiingsamplitude gedefinieerd aan de hand van het geamputeerde en geconnecteerde deel van de Greense functie $\langle 0 | \mathcal{T}(d\psi d^\dagger \psi^\dagger) | 0 \rangle$. Wederom kan een integraalformulering van het verstrooiingsamplitude effectief worden afgeleid door de scattering processen weer te geven als Feynman diagrammen. Uit deze kunnen al de vrije propagators en vertex factoren afgelezen worden. De vrije propagators van de velden d en ψ worden gegeven door respectievelijk $D_0 = 4i/g_2$ en $G_0 = i/(k_0 - \mathbf{k}^2/2 + i\varepsilon)$. Er kunnen hier drie soorten vertices getekend worden; dit zijn twee keer een driepunts vertex met een factor $-ig_2/2$ (waarbij het diatom wordt gecreëerd of waarbij het wordt geannihileerd) en een keer een vierpunts vertex met factor $-ig_3/36$.

De sommatie over de diagrammen staat weergegeven in figuur 10. In vergelijking met onze afleiding werden hier alleen diagrammen van het type 2 en 4 beschouwd in de reeks in deze figuur. De



Figuur 10: Integraal vergelijking voor de drie-deeltjes verstrooiingsamplitude $\mathcal{A}$. De dikke zwarte lijnen stellen hier de totale paarveld propagator voor. Figuur overgenomen uit [2].

enkele lijnen stellen dus de vrije propagator van het veld ψ voor, de dubbele lijnen stellen de vrije propagatie voor van het paarveld, en de vette lijnen stellen de totale propagator voor van het paarveld. Deze laatste kan opnieuw afgeleid worden via een integraalvergelijking, voor details wordt verwezen naar [2], maar de uiteindelijke uitdrukking hiervoor werd gegeven door

$$D(P_0, P) = \frac{32\pi}{g_2^2} \left[1/a - \sqrt{-P_0 + P^2/4 - i\varepsilon} \right]. \quad (5.55)$$

Met alle voorgaande vertex factoren en propagators kan nu een analytische vorm bepaald worden voor de verstrooiingsamplitude. Hiervoor wordt het verstrooiingsproces beschouwd van een atoom en een deeltjespaar met momenta $-p$ en $+p$ voor de inkomende deeltjes, en $-k$ en k voor de uitgaande deeltjes. Deze hebben energieën E_A en $E - E_A$ voor de inkomende deeltjes en E'_A en $E - E'_A$ voor de uitgaande deeltjes. De overeenkomstige STM-vergelijking [67] voor de verstrooiingsamplitude voor het EFT model wordt dan gegeven door

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(E, p, k) = & - \left[\frac{g_2^2/4}{E - E_A - E'_A - (\mathbf{p} + \mathbf{k})^2/2 + i\varepsilon} + \frac{g_3}{36} \right] \\ & + \frac{32i\pi}{g_2^2} \int \frac{dq_0}{2\pi} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \left[\frac{g_2^2/4}{E - E_A - E'_A - (\mathbf{p} + \mathbf{k})^2/2 + i\varepsilon} + \frac{g_3}{36} \right] \\ & \times \frac{1}{q_0 - q^2/2 - i\varepsilon} \frac{\mathcal{A}(E, q, k)}{1/a - \sqrt{-(E - q_0) + q^2/4 - i\varepsilon}} \end{aligned} \quad (5.56)$$

De integraal over het momentum $\mathbf{q}$ kan nu verder opgelost worden met bolcoördinaten. De uitdrukkingen voor de energieën kunnen hier nog verder vervangen worden door $E_A = p^2/2$ en $E'_A = k^2/2$. Tot slot wordt de verstrooiingsamplitude nog vermenigvuldigd met een renormalisatie constante, welke gegeven werd door $Z_D = 64\pi/ag_2^2$. Het uiteindelijke resultaat uit [2] werd dan gegeven door

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_s(E, p, k) = & \frac{16\pi}{a} \left[\frac{1}{2pk} \ln \left(\frac{p^2 + pk + k^2 - E - i\varepsilon}{p^2 - pk + k^2 - E - i\varepsilon} \right) + \frac{H(\Lambda)}{\Lambda^2} \right] \\ & + \frac{4}{\pi} \int_0^\Lambda dq q^2 \left[\frac{1}{2pq} \ln \left(\frac{p^2 + pq + q^2 - E - i\varepsilon}{p^2 - pq + q^2 - E - i\varepsilon} \right) + \frac{H(\Lambda)}{\Lambda^2} \right] \frac{\mathcal{A}_s(E, q, k)}{-1/a + \sqrt{-E + 3q^2/4 - i\varepsilon}}. \end{aligned} \quad (5.57)$$

Hierbij is de functie $H(\Lambda)$ een dimensieloze functie en gerelateerd aan de drie-deeltjes interactiesterkte via

$$g_3 = -\frac{9g_2^2}{\Lambda^2} H(\Lambda). \quad (5.58)$$

Door te kijken naar de verschillen tussen deze uitdrukking voor de verstrooiingsamplitude, voorgesteld in vgl. (5.57), en degene voor de separabele potentiaal gegeven in vgl. (5.47), kan de vorm van de $H(\Lambda)$ afgeleid worden. Door deze vergelijking uit te voeren, lijkt het dus te moeten kloppen dat,

in de limiet wanneer de verstrooiingsamplitudes gelijk zijn, de functie $H(\Lambda)$ geschreven kan worden als

$$\frac{H(\Lambda)}{\Lambda^2} = -\frac{1}{2} \int d\hat{\mathbf{k}} \frac{\xi(|\mathbf{k} + \frac{1}{2}\mathbf{p}|) \xi(|\mathbf{p} + \frac{1}{2}\mathbf{k}|) - 1}{p^2 + \mathbf{p} \cdot \mathbf{k} + k^2 - E}, \quad (5.59)$$

in het sterk-interagerend regime waarbij $1/a \rightarrow 0$. Het verband tussen de interactiesterkte g_3 en de functie $H(\Lambda)$, voorgesteld in vergelijking (5.58), kan in deze vergelijking ingevuld worden. Daarmee kan het uiteindelijke verband gevonden worden tussen de drie-deeltjes interactiesterkte g_3 en de twee-deeltjes interactiesterkte g_2 :

$$g_3 \stackrel{(\text{sterke int.})}{=} \frac{9g_2^2}{2} \int d\hat{\mathbf{k}} \frac{\xi(|\mathbf{k} + \frac{1}{2}\mathbf{p}|) \xi(|\mathbf{p} + \frac{1}{2}\mathbf{k}|) - 1}{p^2 + \mathbf{p} \cdot \mathbf{k} + k^2 - E} \quad (5.60)$$

5.3 Analytische limiet

Vooraleer overgegaan wordt op de numerieke vergelijking tussen de separabele potentiaal en de contact interactie, kan er analytisch ook nog een analogie nagegaan worden in de asymptotische limiet. In ref. [2] wordt er vanuit de integraalvergelijking voor de scattering amplitude, hier voorgesteld in vgl. (5.57), een oplossing gezocht in de limiet van $p \rightarrow \infty$. Hieruit wordt afgeleid dat de verstrooiingsamplitude in deze limiet moet schalen met een macht van p volgens p^{s-1} . Wanneer dit ingevuld wordt in de vergelijking voor $\mathcal{A}_s$, en hierbij E en $1/a$ worden verwaarloosd, dan kan hieruit een voorwaarde afgeleid worden voor s [34]:

$$1 = \frac{8}{\sqrt{3}s} \frac{\sin(\pi s/6)}{\cos(\pi s/2)}, \quad (5.61)$$

Met behulp van deze relatie kan dan een uitdrukking voor de verstrooiingsamplitude bepaald worden. De oplossingen die voldoen aan vergelijking (5.61) met de laagste orde oplossing voor s worden gegeven door $s = \pm i s_0$, met $s_0 = 1.00624$ voor identieke bosonen [68]. De meest algemene oplossing die dan kon afgeleid worden in ref. [2], is gegeven door

$$\mathcal{A}_s(p, k, E) \rightarrow \frac{(1 + s_0^2)^{1/2} \Lambda_*^{-is_0}}{2} p^{-1+is_0} + \frac{(1 + s_0^2)^{1/2} \Lambda_*^{is_0}}{2} p^{-1-is_0}, \quad (5.62)$$

met A_+ en A_- constanten. Dit is dus de asymptotische oplossing voor verstrooiingsamplitude uit het EFT model. Verder wordt ook de vorm van de functie $H(\Lambda)$ effectief afgeleid. De afhankelijkheid van de cutoff ziet eruit zoals

$$H(\Lambda) = \frac{\cos(s_0 \ln(\Lambda/\Lambda_*) + \arctan(s_0))}{\cos(s_0 \ln(\Lambda/\Lambda_*) - \arctan(s_0))}. \quad (5.63)$$

In bovenstaande functie komt ook een nieuwe factor voor, namelijk Λ_* . Deze is gerelateerd aan de trimer golfgetallen κ_* via

$$s_0 \ln \Lambda_* \approx s_0 \ln(2.61\kappa_*) \mod \pi. \quad (5.64)$$

De parameter Λ_* , en specifiek de schaling naar κ_* , kan bepaald worden door middel van experimenten of door het te vergelijken met het microscopische model [26, 34]. Wanneer de getallen Λ_* dus gekend zijn, dan ligt de hele verstrooiingsamplitude van het EFT model dus ook vast. In de latere sectie waarin uiteindelijk de modellen numeriek vergeleken worden, zullen dus eerst alle nodige κ_* waarden berekend moeten worden opdat de functie $H(\Lambda)$ bepaald kan worden.

Het verdere deel van deze sectie zal nagekeken worden of voor ons separabel model ook eenzelfde asymptotische oplossing kan afgeleid worden. Wanneer het voorbeeld uit [2] wordt gevolgd, en in de uitdrukking voor de scattering amplitude, voorgesteld in vgl. (5.53), de inhomogene term hier verwaarloosd wordt (aangezien $1/a \rightarrow 0$), dan blijft er over dat

$$\mathcal{A}_s(E, p, k) = \frac{2}{\pi} \int_0^{+\infty} dq q^2 \frac{H(E, p, q) \mathcal{A}_s(E, q, k)}{\sqrt{-E + 3q^2/4}}. \quad (5.65)$$

Verder wordt de limiet van $p \rightarrow \infty$ genomen en kan ook de energie E worden verwaarloosd tegenover q^2 :

$$\mathcal{A}_s(0, p, k) = \frac{2}{\pi} \int_0^{+\infty} dq q^2 \frac{H(0, p, q) \mathcal{A}_s(0, q, k)}{\sqrt{3}q/2}. \quad (5.66)$$

In het linkerlid van de vergelijking kan dus ook hier gesteld worden dat de scattering amplitude schaalt zoals $\mathcal{A}_s \approx p^{s-1}$,

$$p^{s-1} = \frac{2}{\pi} \int_0^{+\infty} dq q \frac{H(0, p, q) q^{s-1}}{\sqrt{3}/2}. \quad (5.67)$$

In de volgende stap wordt de limiet genomen voor een oneindige cutoff, $\Lambda \rightarrow \infty$, maar wordt er wel nog steeds verondersteld dat $p \ll \Lambda$, sinds de cutoff wel nog steeds de grootste momentum schaal moet voorstellen in het probleem. Via de x_{max} uitdrukkingen, uitgeschreven in sectie (5.1), kan afgeleid worden dat $x_{max} > 1$ hier altijd voldaan is, aangezien $\Lambda > p + q/2$ en $\Lambda > q + p/2$ hier altijd zullen gelden. Deze integraal $H(0, p, q)$ zal dus altijd de cutoff onafhankelijke oplossing geven hier, voorgesteld in vergelijkingen (5.51) en (5.52), zodat

$$p^{s-1} = \frac{4}{\sqrt{3}\pi} \int_0^{+\infty} dq \frac{1}{pq} \ln \left(\frac{p^2 + q^2 + pq}{p^2 + q^2 - pq} \right) q^s. \quad (5.68)$$

In deze integraal kan nu de substitutie $q = xp \Rightarrow dq = p dx$ doorgevoerd worden om dit wat te vereenvoudigen, wat leidt tot

$$p^{s-1} = \frac{4}{\sqrt{3}\pi} \int_0^{+\infty} p dx \frac{1}{p} \ln \left(\frac{1 + x^2 + x}{1 + x^2 - x} \right) x^{s-1} p^{s-1}. \quad (5.69)$$

Het momentum p kan langs beide kanten weggedeeld worden en de overblijvende integraal heeft een eenduidige oplossing, gegeven door

$$1 = \frac{8}{\sqrt{3}s} \frac{\sin(\pi s/6)}{\cos(\pi s/2)}, \quad (5.70)$$

wat terug op hetzelfde resultaat uitkomt als het EFT model uit ref. [2]. Dit toont dus aan dat de oplossingen voor de scattering amplitude uit het separabel model en het EFT model in de asymptotische limiet equivalent worden.

Deze afleiding was nu geldig in de limiet waarin de cutoff Λ naar oneindig nadert. Echter kan dit ook meer algemeen benaderd worden waarbij ook eindige cutoffs beschouwd worden, maar wel nog steeds geldt dat $\Lambda \gg p$, en dus Λ de grootste lengteschaal blijft. Uit formule (5.70) blijkt dus dat er verschillende oplossingen bestaan voor de scattering amplitude voor verschillende s -waarden. In de laagste orde waren de oplossingen puur imaginair $s = \pm is_0$. In een meer algemeen geval kan

de oplossing voor de scattering amplitude geschreven worden als een som van alle verschillende oplossingen, die elk met een bepaalde amplitude $C(\Lambda)$ meetellen,

$$\mathcal{A}_s(p, \Lambda) \approx C_0(\Lambda)p^{is_0} + C_1(\Lambda)p^{is_1} + C_2(\Lambda)p^{is_2} + \dots \quad (5.71)$$

De algemene oplossing voor de verstrooiingsamplitude kan dan geschreven worden als een combinatie van al deze oplossingen [26] en wordt gegeven door

$$\mathcal{A}_s(p, \Lambda) = C(\Lambda) \cos \left(s_0 \ln \frac{p}{p_*} \right). \quad (5.72)$$

Hierin is de parameter p_* ook een functie van de cutoff volgens het verband

$$p_*(\Lambda) = \exp(-\delta/s_0)\Lambda, \quad (5.73)$$

waarbij δ een dimensieloos getal voorstelt. Wanneer dus verondersteld wordt dat $\mathcal{A}_s$ kan geschreven worden zoals voorgesteld in vergelijking (5.72), en dus ook $\mathcal{A}_s(p, \Lambda) = C(\Lambda) \cos(s_0(\log p - \log p_*))$, dan betekent het dat een veranderende cutoff zal zorgen voor faseshift in de cosinus vorm. De oplossing voor de verstrooiingsamplitude uit het EFT model uit vgl. (5.62) kan ook in een goniometrische vorm opgeschreven worden net zoals in (5.72). Met de constanten A_+ en A_- uit [2] ingevuld, wordt de uitdrukking gegeven door

$$\mathcal{A}_s(p, k, E) = \frac{(1 + s_0^2)^{1/2} \Lambda_*^{-is_0}}{2} p^{-1+is_0} + \frac{(1 + s_0^2)^{1/2} \Lambda_*^{is_0}}{2} p^{-1-is_0}. \quad (5.74)$$

Het kan aangetoond worden dat deze vergelijking in zijn goniometrische vorm kan omgeschreven worden, en na wat rekenwerk neerkomt op

$$\mathcal{A}_s(p, k, E) = \frac{\sqrt{1 + s_0^2}}{p} \cos(s_0 \ln(p/\Lambda_*)). \quad (5.75)$$

Eerst en vooral valt het dus op dat de amplitude van de EFT met de contact interactie enkel afhangt van het inverse momentum. Ten tweede is het ook interessant dat het momentum in het argument van de cosinus alleen verschijnt in een logaritmische vorm. Hierdoor zal het later in het numerieke gedeelte dus vaak handiger zijn om deze functie voor te stellen op een logaritmische schaal.

5.4 Numerieke vergelijking

In deze sectie worden de eerder afgeleide analytische resultaten numeriek geïmplementeerd. Het doel bestaat erin om de verstrooiingsamplitudes te berekenen, welke de informatie bevatten over de drie-deeltjesinteracties, en om zo de verschillen tussen de twee modellen zichtbaar te maken. De eerste stap in de numerieke werkwijze bestaat uit het bepalen van de golfgetallen van de Efimov trimers. Deze zijn belangrijk om de parameter Λ_* vast te leggen in de functie $H(\Lambda)$, welke op zijn beurt optreedt in de integraalvergelijking van de effectieve veldentheorie met de contact interactie. Zodra deze golfgetallen gekend zijn, kan de eigenlijke berekening van de verstrooiingsamplitudes dus uitgevoerd worden.

Hiervoor wordt de integraalvergelijking voor de verschillende $\mathcal{A}_s$ eerst herschreven in de vorm van een lineaire vergelijking:

$$(\text{Id} - Z)\mathcal{A} = b, \quad (5.76)$$

met Id de eenheidsmatrix, $\mathcal{A}$ de onbekende scattering amplitude, b de inhomogene term, en Z de integraalkernel. Voor ons specifieke geval met de separabele interacties, voorgesteld in vergelijking (5.47), nemen deze termen de vorm aan van

$$b = \frac{8\pi}{a} H(E, p, k), \quad (5.77)$$

$$Z = \frac{2}{\pi} \int dq q^2 H(E, p, q) \frac{1}{1/a + \sqrt{-E + 3q^2/4}}, \quad (5.78)$$

waarbij de verschillende oplossingen voor de integraal $H(E, p, q)$ afgeleid werden in sectie (5.1). De integraal over q in de kernel Z maakt het nodig dat deze uitdrukking als numerieke integraalvergelijking wordt opgelost. Hiervoor wordt gebruik gemaakt van een Gaussisch kwadratuurschema (= Gaussian quadrature integration scheme) [69], waarbij de integraal benaderd wordt zoals

$$\int_0^\infty f(q) dq \approx G_n = \sum_{i=1}^n w_i f(q_i), \quad (5.79)$$

waarbij $f(q)$ het hele integrandum uit vergelijking (5.78) omvat. In deze formule stellen q_i de nodes voor binnen het integratiebereik, en w_i de bijhorende gewichtsfactoren. Voor ons specifieke probleem bestaat de functie $f(q)$ uit drie verschillende factoren: een factor q^2 , de term $H(E, p, q)$, en de noemer die de twee-deeltjes transitie matrix $\tau(Z_q)$ voorstelt. Het geschreven programma berekent dan voor elk punt q_i de bijdrage aan de som, en voert dit uit op een niet-uniform grid, welke werd verdeeld in vier aanliggende regio's. Deze opsplitsing laat toe om zowel voor lage momenta als voor grote momenta de convergentie te optimaliseren.

Op deze manier wordt de oorspronkelijke integraalvergelijking dus omgezet in een matrixvergelijking die numeriek bepaald worden voor verschillende combinaties van de uitgaande en inkomende momenta p en k . Tot slot wordt het diagonaal element genomen in de lage-energie limiet, met als resultaat $\mathcal{A}_s(p, p, 0)$.

5.4.1 Efimov fysica

Vooraleer de verstrooiingsamplitudes voor de twee modellen bepaald kunnen worden, moet eerst nog gekeken worden naar de functie $H(\Lambda)$ uit de contact interactie. Herinner dat deze werd gegeven door

$$H(\Lambda) = \frac{\cos(s_0 \ln(\Lambda/\Lambda_*) + \arctan(s_0))}{\cos(s_0 \ln(\Lambda/\Lambda_*) - \arctan(s_0))}. \quad (5.80)$$

De parameter Λ_* kon bepaald worden als functie van κ_* via het verband

$$\Lambda_* = 2.62 \times \kappa_*^{(n)} e^{n\pi/s_0}. \quad (5.81)$$

Om de trimer golfgetallen te bepalen werd een programma gemaakt waarin deze berekend kunnen worden voor $E \rightarrow 0$. In dit regime valt de inhomogene term b dus volledig weg. Echter is het wel nodig hier om een andere vorm af te leiden voor de twee-deeltjes transitie matrix, welke wordt voorgesteld hier door de factor $\tau(Z_q)$. Degene die nu wordt gebruikt in vergelijking (5.78) is alleen geldig in het verstrooiingsregime, en kan niet worden gebruikt om de gebonden toestanden te bepalen. Om een vorm af te leiden die hier wel kan toegepast worden, kan opnieuw gestart worden vanaf vgl. (3.88) met $g = 0$. In sectie (3.5.1) werden de uitdrukking voor ν en β bepaald als functie van de cutoff Λ en de resonantie breedte parameter R_* . De totale uitdrukking voor de integraal

$I(E, \Lambda)$ voor negatieve energie is ook gekend uit vergelijking (3.23). Wanneer deze allemaal worden gesubstitueerd in vergelijking (3.88), dan wordt de T -matrix gelijk aan

$$T = [E/\beta^2 - \nu/\beta^2 - 4\pi I]^{-1} = \left[8\pi^2 \mu^2 E R_* + \frac{1}{2\mu R_*} \left(\frac{1}{a} - \frac{2\Lambda}{\pi} \right) 8\pi^2 \mu^2 R_* - 4\pi (2\mu)^{3/2} \sqrt{E} \operatorname{arctanh} \left(\frac{\Lambda}{\sqrt{2\mu E}} \right) + 8\pi \mu \Lambda \right]^{-1}. \quad (5.82)$$

Met wat rekenwerk, en de gereduceerde massa $\mu = 1/2$ verondersteld, kan dit verder vereenvoudigd worden tot

$$T = \left[2\pi \left(E R_* + \frac{\pi}{a} - 2\sqrt{E} \operatorname{arctanh} \left(\Lambda/\sqrt{E} \right) \right) \right]^{-1}. \quad (5.83)$$

Tot slot wanneer we geïnteresseerd zijn in het sterk interagerende regime, dan vergemakkelijkt dit verder tot

$$T = \frac{1}{-4\pi \sqrt{E} \operatorname{arctanh} \left(\Lambda/\sqrt{E} \right)}. \quad (5.84)$$

Dit is dus de algemene T -matrix voor het gebonden probleem met negatieve bindingsenergie. Deze uitdrukking zal later van pas komen om de κ_* waarden te zoeken van de Efimov trimers.

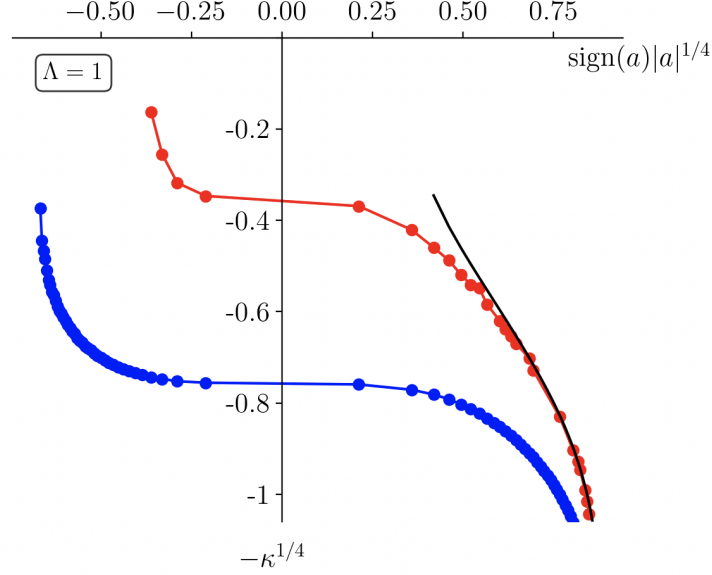
De uiteindelijke integraal vergelijking vereenvoudigt nu dus tot $(\operatorname{Id} - Z)\mathcal{A}_s = 0$. Het geschreven programma berekent dan de matrix $\operatorname{Id} - Z(\kappa)$ voor een gegeven waarde van κ en bepaalt de determinant ervan. Hierbij stelt $Z(\kappa)$ dus de gediscretiseerde versie voor van de integraal. Wanneer deze determinant dan gelijk wordt aan nul, dan duidt dit op de aanwezigheid van een gebonden toestand met golfgetal κ . Zo kan er dus een hele verzameling aan κ waarden getest worden, en wanneer de determinant van teken wisselt dan wordt de waarde voor het golfgetal opgeslagen.

Uit dit programma volgen dus een hele reeks aan golfgetallen $\kappa_*^{(n)}$ welke voldoen aan vergelijking (5.81). Deze waarden zouden dus moeten voldoen aan het Efimov spectrum zoals in de inleiding beschreven. De resultaten voor de twee diepst gebonden trimers staan weergegeven in figuur 11 voor een cutoff $\Lambda = 1$. Verder in tabel (2) staan de drie laagste trimers opgesomd voor het punt dat $1/a = 0$. Uit de inleiding was reeds bekend dat de golfgetallen van opeenvolgende Efimov toestanden normaal een factor 22.7 van elkaar verschillen. Zoals volgt uit de tabel is dit voor $\kappa_*^{(2)}$ en $\kappa_*^{(1)}$ inderdaad goed benaderd, maar voor $\kappa_*^{(1)}$ en $\kappa_*^{(0)}$ treedt hier een kleine afwijking op, aangezien de verhouding daar gelijk wordt aan ≈ 24.2 .

Dit is het gevolg van het feit dat het model voorgesteld in de inleiding geldig was voor een ‘zero-range’ interactie, terwijl dat hier wel een eindige interactieafstand in rekening wordt gebracht. Deze eindige dracht effecten beïnvloeden vooral de diepst gebonden trimer toestand $n = 0$, aangezien deze het grootste golfgetal heeft. Dit komt overeen met een kleinere ruimtelijke afstand, waardoor het dus gevoeliger zal zijn voor de details van de interacties op korte afstand.

Λ	$\kappa_*^{(0)}$	$\kappa_*^{(1)}$	$\kappa_*^{(2)}$
1	0.31703004	0.01310671	0.00057744

Tabel 2: Voorstelling van de golfgetallen van de Efimov trimers voor de grondtoestand $\kappa_*^{(0)}$, en voor de eerste en tweede geëxciteerde toestand $\kappa_*^{(1)}$ en $\kappa_*^{(2)}$ voor een cutoff waarde van $\Lambda = 1$.

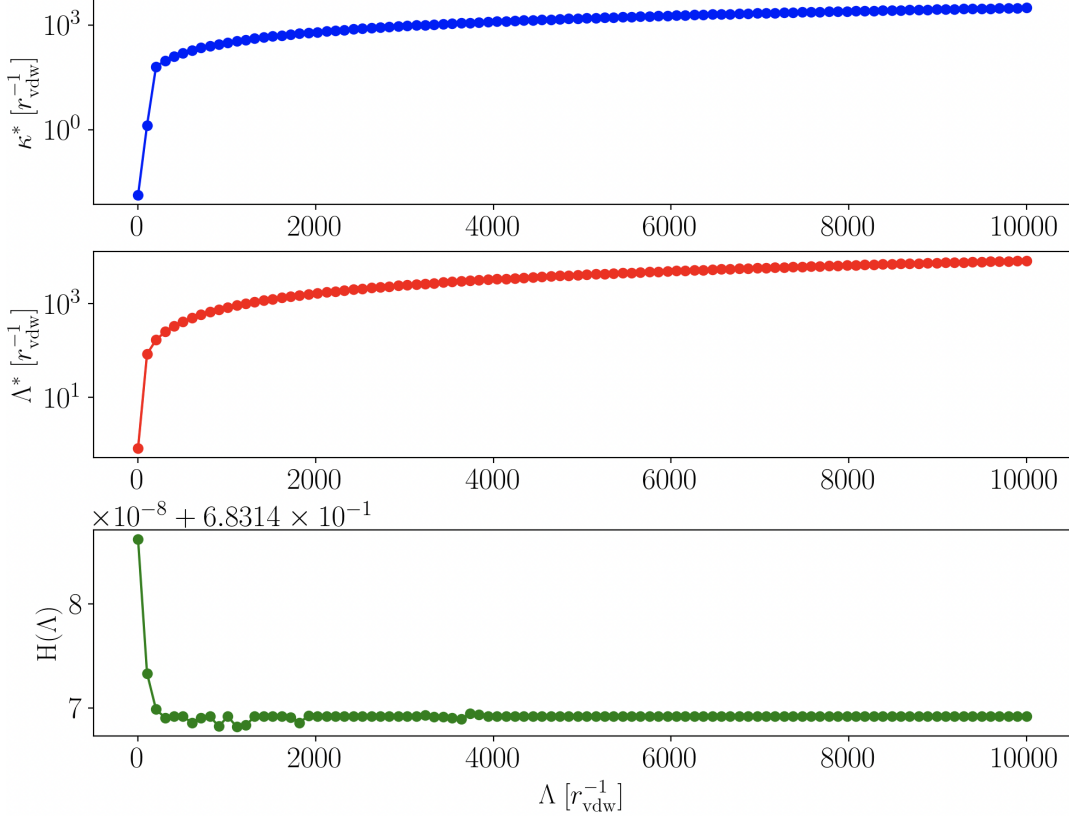


Figuur 11: Schematische voorstelling van de golfgetallen van de Efimov trimers voor een cutoff $\Lambda = 1$. De diepst gebonden toestand stelt de grondtoestand $\kappa_*^{(0)}$ voor (blauwe grafiek), en daarboven $\kappa_*^{(1)}$ de eerste geëxciteerde toestand (rode grafiek). Beide komen uit op de zwarte lijn, welke de dimer bindingsenergie voorstelt.

Nu kan deze werkwijze herhaald worden voor alle mogelijke cutoff waarden waarvoor de verstrooiingsamplitudes graag berekend zouden worden. Hiervoor zal telkens de grondtoestand waarde voor κ_* genomen worden, zodat Λ_* simpelweg bepaald kan worden via $\Lambda_* = 2.61 \times \kappa_*^{(0)}$. Tot slot kan dan de waarde van de functie $H(\Lambda)$ berekend worden met vergelijking (5.80) en ingevuld worden in de scattering amplitude. Hier werd gekozen om de cutoff te variëren van 1 t.e.m. 10^4 . De resultaten voor $\kappa_*^{(0)}$, Λ_* en $H(\Lambda)$ staan weergegeven in figuur 12 voor $1/a = 0$.

Het verband tussen $\kappa_*^{(0)}$ en de cutoff staat in de bovenste subplot voorgesteld, waarbij de golfgetallen staan voorgesteld op een logaritmische schaal. Uit de figuur blijkt dat $\kappa_*^{(0)}$ toeneemt met stijgende Λ . Dit sluit aan bij het idee dat een grotere cutoff overeenkomt met een kleinere interactierange. In de limiet van een contact interactie, waarbij $\Lambda \rightarrow \infty$, is het Efimov spectrum niet langer langs onder begrensd. Hierdoor schuift de diepste trimer ook richting een oneindige bindingsenergie. Dit fenomeen wordt ook wel de ‘Thomas collapse’ genoemd [6, 70]. Uit de data van deze figuur wordt ook aangetoond dat er een lineair verband bestaat tussen $\kappa_*^{(0)}$ en Λ . Het verband tussen Λ_* en Λ zal dan ook een lineair verband zijn, aangezien κ_* en Λ_* deze alleen verschillen met een constante factor.

Tot slot werd dan ook de functie $H(\Lambda)$ geplot voor de verschillende cutoffs. Hier valt het direct op dat deze functie convergeert naar een constante waarde van $H(\Lambda) \approx 6.831 \times 10^{-1}$. Dit is wel opmerkelijk, aangezien deze functie altijd voorkomt als $H(\Lambda)/\Lambda^2$ in de verstrooiingsamplitude. Wanneer Λ dan toeneemt, wilt het zeggen dat deze factor kleiner en kleiner zal worden. In de volgende subsectie zullen deze Λ_* waarden nu geïmplementeerd worden in het programma zodat de verstrooiingsamplitudes naast elkaar gelegd kunnen worden.



Figuur 12: Resultaat van het verband tussen de Efimov trimer golfgetallen $\kappa_*^{(0)}$, Λ_* , en de functie $H(\Lambda)$ met de cutoff Λ . De grootheden staan hier voorgesteld in van der Waals eenheden [61].

5.4.2 Verstrooiingsamplitudes

Nu dat alle parameters gekend zijn, kunnen tot slot de scattering amplitudes bepaald worden. Er zullen telkens drie verschillende verstrooiingsamplitudes vertoond worden: degene met de separabele potentiaal, vgl. (5.53), degene uit de EFT met de contact interactie [2], vgl. (5.57), en dan als derde de contact limiet van de separabele potentiaal. Deze laatste is tot hertoe nog niet besproken geweest, maar wordt hier extra toegevoegd om goed het verschil tussen beide modellen te kunnen bekijken. Hiervoor wordt dus eigenlijk dezelfde verstrooiingsamplitude geplot als in vergelijking (5.53), maar wordt de uitdrukking voor de integraal $H(\Lambda)$ aangepast. Zoals eerder besproken in sectie (5.3) is het dus zo dat je voor het contact probleem altijd in één van de drie mogelijke regio's van de integraal zit, en dat is dan de oplossing die Λ onafhankelijk is. Dit kan afgeleid worden door te kijken naar de voorwaarden voor x_{max} . Bij de conditie dat deze groter wordt dan 1, dan volgen de voorwaarden dat $\Lambda > p + q/2$ voor $H^{(1)}$, en $\Lambda > q + p/2$ voor $H^{(2)}$. De contact limiet wilt zeggen dat er wordt verondersteld dat $\Lambda \rightarrow \infty$. In deze limiet zijn bovenstaande twee voorwaarden altijd voldaan, en wordt er verder geen restrictie gemaakt op p en q .

Voor de contact limiet moet dus de integraal $H(p, q, E)$ vervangen worden door één van de oplossingen in (5.48). Hierdoor wordt dus eigenlijk de vormfactor ‘weggehaald’ uit de analyse, waardoor het model terug wordt herleid tot het contact probleem. De oplossing die dan wordt overgehouden met het logaritme (zonder de cutoff afhankelijkheid) is ook precies de oplossing die voorkomt in het EFT model met de contact interactie uit [2]. Hierdoor kan er een beter zicht komen op wat nu exact het effect is van de drie-deeltjes interactie. Om dit goed te kunnen zien, moet er gekeken worden of

er eenzelfde functie afgeleid kan worden zonder de drie-deeltjes correctie. Het twee-deeltjes gedeelte wordt hier terug gekregen wanneer de vormfactoren niet meer in rekening worden gehouden, want dan wordt terug bekomen wat er in [2] staat, zonder de $H(\Lambda)$ functie.

Dus samengevat zijn dit de drie integraal uitdrukkingen welke numeriek berekend zullen worden in het komende gedeelte:

- Model met de separabele potentiaal:

$$\mathcal{A}_s(E, p, k) = \frac{8\pi}{a} H(E, p, k) + \frac{2}{\pi} \int_0^\infty dq q^2 \frac{H(E, p, q) \mathcal{A}_s(E, q, k)}{1/a + \sqrt{-E + 3q^2/4}},$$

met de integraal $H(E, p, k)$ uitgeschreven in vergelijking (5.48).

- Model uit de effectieve veldentheorie met contact interactie uit [2]:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_s(E, p, k) = & \frac{8\pi}{a} \left[\frac{1}{pk} \ln \left(\frac{p^2 + pk + k^2 - E}{p^2 - pk + k^2 - E} \right) + \frac{2H(\Lambda)}{\Lambda^2} \right] \\ & + \frac{2}{\pi} \int_0^\Lambda dq q^2 \left[\frac{1}{pq} \ln \left(\frac{p^2 + pq + q^2 - E}{p^2 - pq + q^2 - E} \right) + \frac{2H(\Lambda)}{\Lambda^2} \right] \frac{\mathcal{A}_s(E, q, k)}{1/a + \sqrt{-E + 3q^2/4}}, \end{aligned}$$

met de uitdrukking voor de functie $H(\Lambda)$ voorgesteld in uitdrukking (5.80), en waarvoor de nodige Efimov trimers zijn bepaald in de vorige subsectie².

- Model met de separabele potentiaal in de contact limiet $\Lambda \rightarrow \infty$:

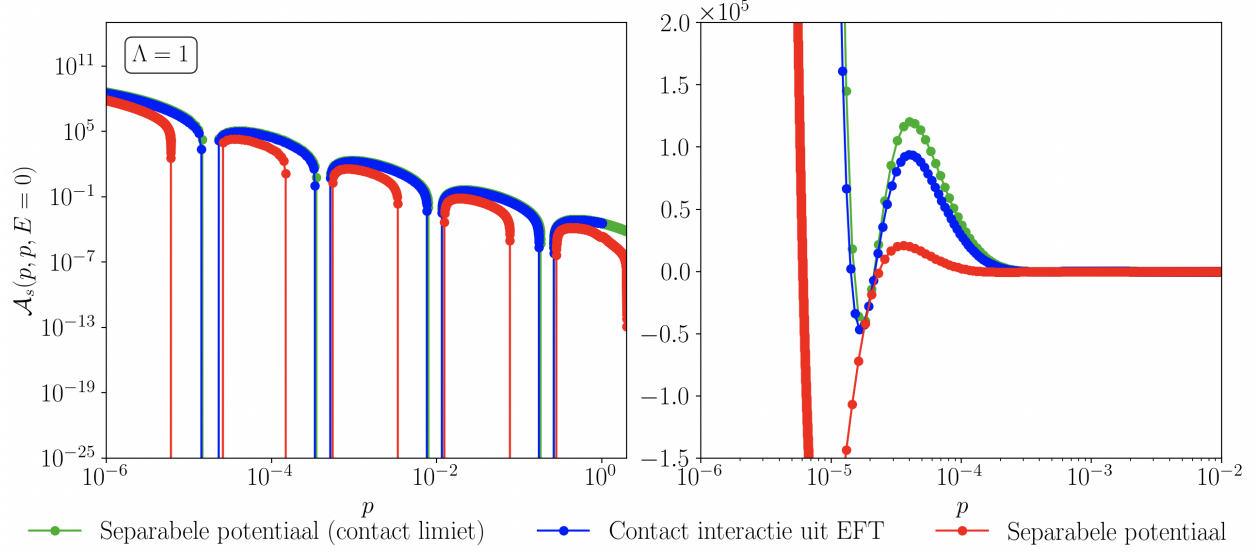
$$\begin{aligned} \mathcal{A}_s(E, p, k) = & \frac{8\pi}{a} \frac{1}{pk} \ln \left(\frac{p^2 + k^2 + pk - E}{p^2 + k^2 - pk - E} \right) \\ & + \frac{2}{\pi} \int_0^\infty dq \frac{q}{p} \ln \left(\frac{p^2 + q^2 + pq - E}{p^2 + q^2 - pq - E} \right) \frac{\mathcal{A}_s(E, q, k)}{1/a + \sqrt{-E + 3q^2/4}}, \end{aligned}$$

waarvoor hier voor de integraal $H(E, p, k)$ de cutoff onafhankelijke oplossing werd ingevuld.

Voor dit programma zal steeds gewerkt worden in de limiet van energie $E \rightarrow 0$, en bij een verstrooiingslengte van $a = 10^6$. De effectieve range R_{eff} wordt hier nog voorlopig buiten beschouwing gelaten. Allereerst werden deze drie vergelijkingen opgelost voor een cutoff $\Lambda = 1$, waarvan het resultaat weergegeven staat in figuur 13. De rode grafiek komt overeen met ons model met de separabele interacties, de groene grafiek stelt de contact limiet hiervan voor, en de blauwe grafiek beschrijft het model uit de EFT met de contact interacties. Op de linkse figuur staan zowel het momentum p als de scattering amplitudes voorgesteld op een logaritmische schaal, terwijl rechts voor de scattering amplitude een lineaire schaal wordt gebruikt, maar voor p wel de logaritmische schaling werd behouden. In de rechtste figuur wordt duidelijk dat dit alle drie fel oscillerende functies zijn, waarbij voor kleine p heel grote oscillaties voorkomen, en deze kleiner en kleiner worden naarmate het momentum toeneemt. Deze nemen dus eigenlijk de vorm aan van een gedempte oscillatie in p . Merk ook op dat hier op de y -as ook zeer grote amplitudes mee overeenkomen.

Dit geheel vertaalt zich dan ook naar de log-log figuur links. Hierbij nemen de amplitudes dus af naarmate het momentum toeneemt, wat een resultaat is van de gedempte oscillatie. Verder valt het

²Herinner uit de sectie over de analogie met de twee-kanalen model (4.3) dat er een inconsistentie werd vastgesteld in het teken dat optreedt in de propagator van het diatoom. Een gelijkaardig probleem duikt opnieuw op in de noemer van vergelijking (5.57), waar het teken $-1/a$ verschijnt in plaats van $+1/a$. Aangezien de oorsprong van dit teken niet achterhaald kon worden, zal in wat volgt aangenomen worden dat dit teken onjuist is. Er zal dus verder $+1/a$ gebruikt worden in de EFT uitdrukking, zoals in bovenstaande vergelijking al werd aangepast.

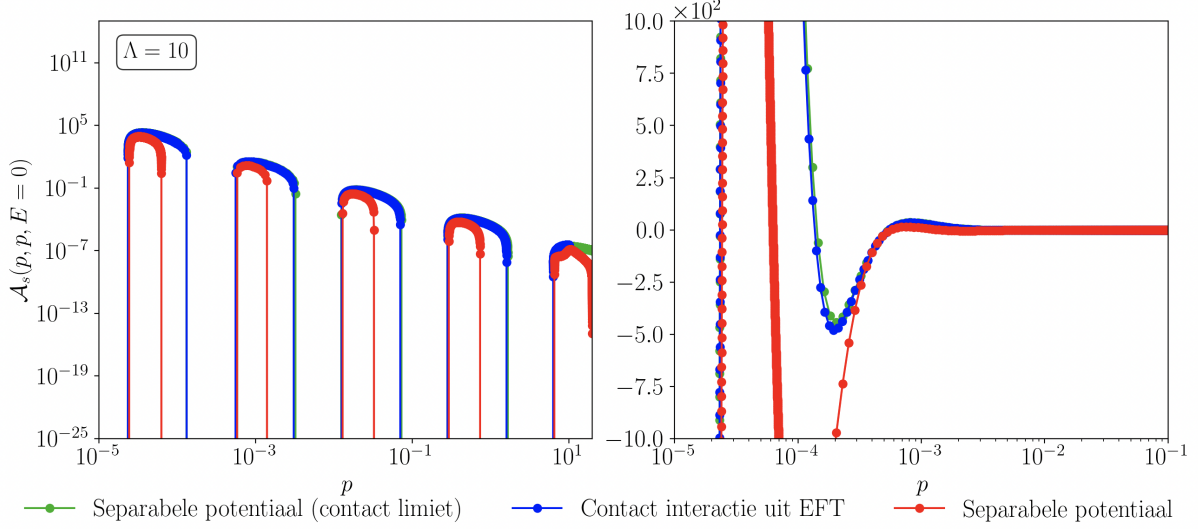


Figuur 13: Voorstelling van de scattering amplitudes voor de separabele potentiaal (rood), de separabele potentiaal in de contact limiet (groen), en het EFT model met contact interactie (blauw) als functie van het momentum p voor $\Lambda = 1$. Op de linkse figuur staan deze voorgesteld op een logaritmische schaal, en rechts op een lineaire schaal.

op dat deze grafieken overeenkomen met een periodische functie. Sinds hier een logaritmische schaal wordt gebruikt, worden alleen de punten afgebeeld waarvoor geldt dat de verstrooiingsamplitude groter is dan nul, en dus positief is. Sinds de afstand tussen opeenvolgende pieken kleiner is dan de breedte van een enkele piek bevestigt dit ook dat de scattering amplitude een grotere oscillatie maakt boven $y = 0$ dan onder $y = 0$. In de linkse figuur is de groene grafiek, welke overeenkomt met de contact limiet van de separabele potentiaal ook moeilijk zichtbaar. Dit komt dus omdat deze en het EFT model zo goed als gelijke resultaten geven. Op de rechtse figuur hebben deze wel kleine amplitude verschillen, maar aangezien de breedte van de oscillaties wel even groot zijn worden deze op de log-log voorstelling even breed.

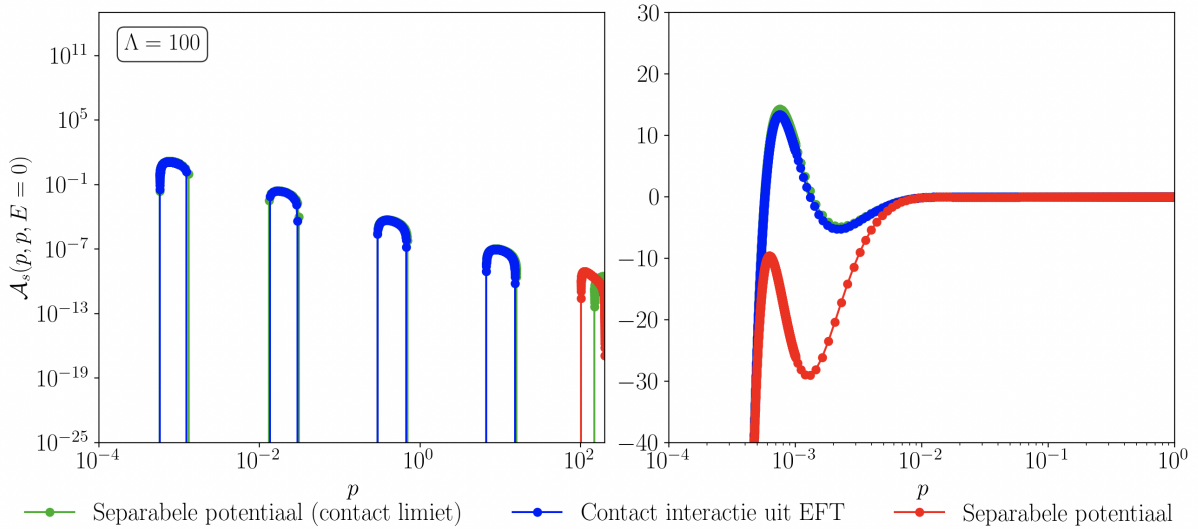
Verder valt het ook op dat het model met de separabele potentiaal wel verschilt van de andere twee modellen. Op de rechtse grafiek wordt dit duidelijk aangezien de rode grafiek dus diepe oscillaties maakt voor negatieve verstrooiingsamplitudes, en kleinere oscillaties maakt voor positieve waarden in vergelijking met de andere twee grafieken. Daardoor krijgt de rode grafiek dus ook een kleinere breedte op de logaritmische schaling links. De periode tussen opeenvolgende pieken komt voor alle grafieken wel overeen. Dit komt als resultaat dat alle verstrooiingsamplitudes door hetzelfde nulpunt gaan wanneer deze overgaan van negatief naar positief. Tot slot worden de verstrooiingsamplitudes ook maar afgebeeld tot op $p = 2\Lambda$ voor het separabel model en tot op $p = \Lambda$ voor het EFT model, aangezien deze voor grotere momenta gelijk worden aan nul. Voor ons model is dit het resultaat van de vormfactoren. Hier kwamen altijd combinaties van twee momenta in voor, welke een maximaal verschil in grootte kunnen geven van 2Λ . Ter consistentie werd voor de contact limiet dezelfde grens behouden. Voor het model uit de EFT volgde het uit de regularisatie voorwaarden dat $p < \Lambda$.

De volgende stap is nu om te kijken wat er gebeurt bij grotere cutoffs. In totaal zal de verstrooiingsamplitude bepaald worden tot op $\Lambda = 10^5$. In figuur 14 staan de amplitudes geplot voor $\Lambda = 10$. Het eerste grote verschil met het vorige geval met de kleinere $\Lambda = 1$, bestaat in de verandering aan breedte. Alle grafieken zijn hier smaller geworden op de linkse figuur, maar het separabele

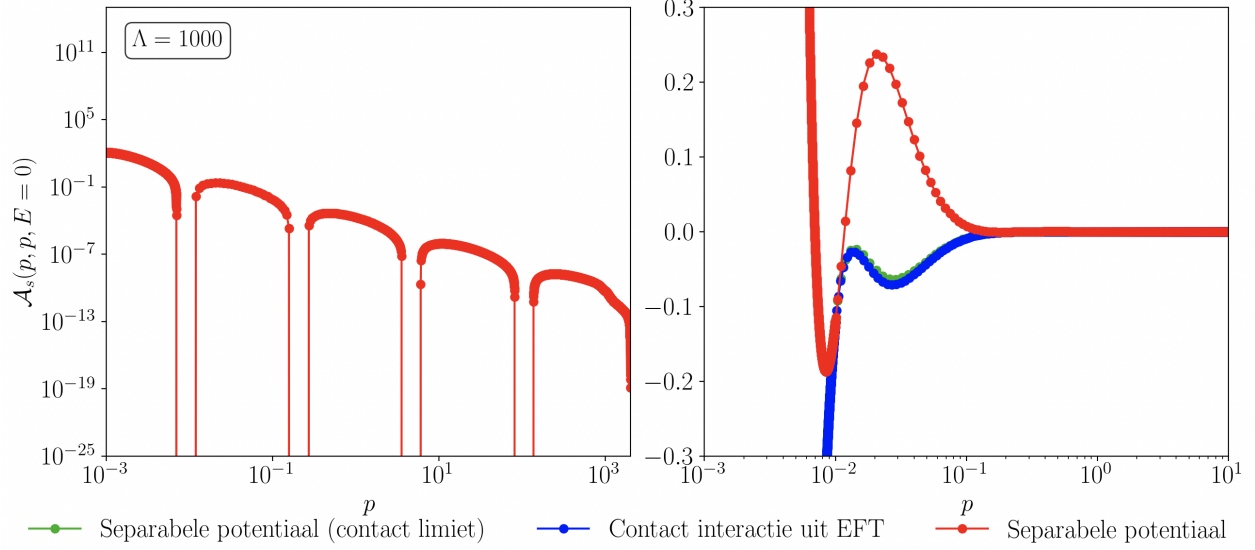


Figuur 14: Voorstelling van de scattering amplitudes voor de separabele potentiaal (rood), de separabele potentiaal in de contact limiet (groen), en het EFT model met contact interactie (blauw) als functie van het momentum p voor $\Lambda = 10$. Op de linkse figuur staan deze voorgesteld op een logaritmische schaal, en rechts op een lineaire schaal.

model blijft wel de smalste van de drie. De contact limiet en het EFT model overlappen nog steeds volledig. Verder zijn de grafieken ook opgeschoven naar grotere momenta, wat opnieuw resulteert van de vormfactoren en het overeenkomstige grid. Merk ook op dat de amplitude van de oscillaties in de rechtste figuur al met enkele grootteordes zijn afgenomen. In het linkse grid is dit duidelijk te zien door de afname aan amplitude in elke piek. Numeriek werd er aangetoond dat de amplitudes van alle drie de grafieken schalen zoals $1/p^2$, voor alle waarden van de cutoff die in deze sectie behandeld zullen worden.



Figuur 15: Voorstelling van de scattering amplitudes voor de separabele potentiaal (rood), de separabele potentiaal in de contact limiet (groen), en het EFT model met contact interactie (blauw) als functie van het momentum p voor $\Lambda = 10^2$. Op de linkse figuur staan deze voorgesteld op een logaritmische schaal, en rechts op een lineaire schaal.

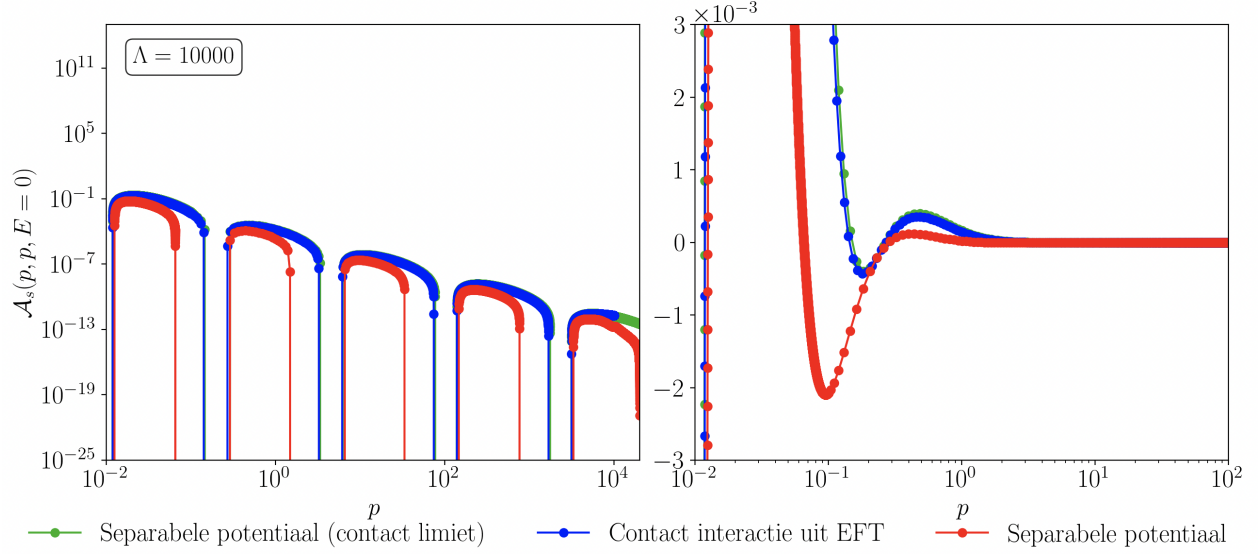


Figuur 16: Voorstelling van de scattering amplitudes voor de separabele potentiaal (rood), de separabele potentiaal in de contact limiet (groen), en het EFT model met contact interactie (blauw) als functie van het momentum p voor $\Lambda = 10^3$. Op de linkse figuur staan deze voorgesteld op een logaritmische schaal, en rechts op een lineaire schaal.

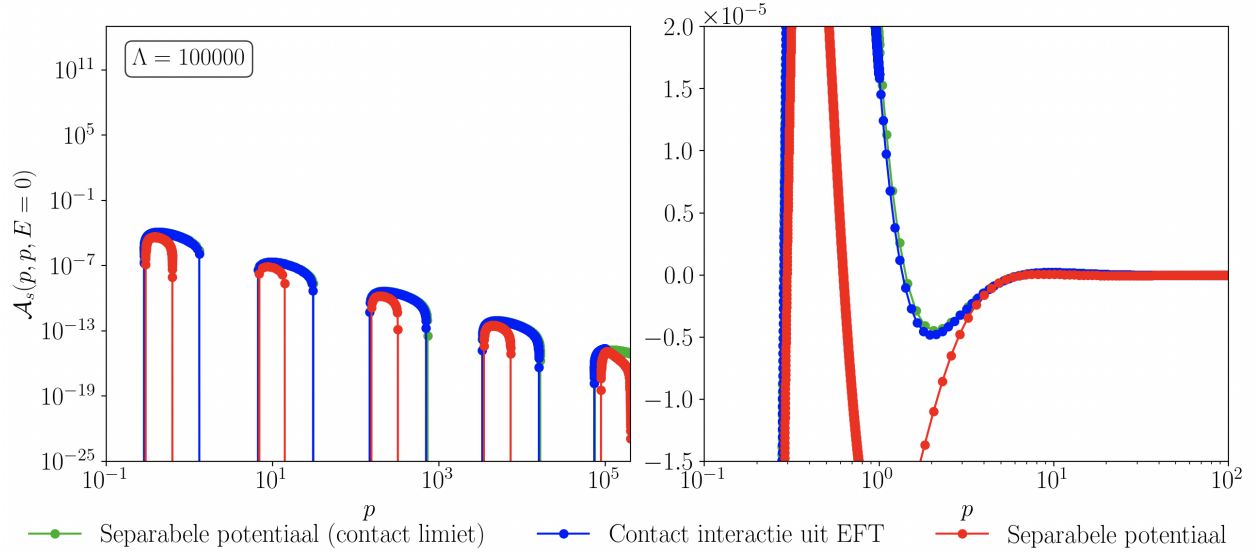
De scattering amplitudes voor de cutoffs $\Lambda = 10^2$ en $\Lambda = 10^3$ staan afgebeeld in figuren 15 en 16. Deze resultaten zien er anders uit als de vorige in de zin dat hier op de linkse figuur sommige grafieken gelijk aan nul lijken. Echter is dit niet zo en komt dit gewoon overeen met een negatieve verstrooiingsamplitude. Voor het eerste geval wordt $\Lambda = 10^2$. De contact limiet en de EFT amplitude overlappen hier weer helemaal tot $p = \Lambda$.

Het is trouwens te verwachten dat deze voor grotere cutoffs beter en beter op elkaar gelijkken. Zoals ook al eerder vermeld werd het in de vorige sectie werd besloten dat de $H(\Lambda)$ eigenlijk nadert naar een klein constant getal. Aangezien deze alleen in de uitdrukking van de verstrooiingsamplitude voorkomt zoals $H(\Lambda)/\Lambda^2$, zal deze term steeds kleiner worden voor toenemende cutoff, en uiteindelijk een verwaarloosbare bijdrage geven. In deze limiet worden de formules voor de scattering amplitudes benaderend gelijk en zullen de grafieken dus ook heel identiek worden. In deze grafiek wordt verder de separabele grafiek bijna overal negatief, buiten voor $p > \Lambda$. Voor $\Lambda = 10^3$ wisselen deze rollen om en worden de contact limiet en het EFT model overal negatief, en wordt het separabel model positief.

Dan tot slot wordt de cutoff nog verder verhoogd tot $\Lambda = 10^4$ in figuur 17 en tot $\Lambda = 10^5$ in figuur 18. Op beide figuren zijn de drie verschillende grafieken terug zichtbaar op de figuur met de logaritmisch geschaalde assen. Merk op dat dat er voor $\Lambda = 1$ en $\Lambda = 10^4$ er een hele grote gelijkenis bestaat. Deze grafieken voor deze twee gevallen hebben namelijk benaderend eenzelfde breedte op de log-log plot. Eenzelfde gelijkenis kan herkend worden tussen $\Lambda = 10$ en $\Lambda = 10^5$. Er blijkt dus een soort van oscillerend patroon te ontstaan in de breedte van de verstrooiingsamplitude voor toenemende waarden van Λ . Ook blijft de amplitude van de scattering amplitude verder afnemen. Voor $\Lambda = 10^5$ bereikt deze de ondergrens van de precisie van het programma, waardoor dit de maximale waarde voor de cutoff is waarvoor de verstrooiingsamplitudes bepaald kunnen worden. Echter voor nog grotere cutoffs is het te verwachten dat de breedtes van de grafieken weer afnemen, tot deze niet zichtbaar worden, en dan weer eenzelfde patroon volgen zoals bij $\Lambda = 1$.



Figuur 17: Voorstelling van de scattering amplitudes voor de separabele potentiaal (rood), de separabele potentiaal in de contact limiet (groen), en het EFT model met contact interactie (blauw) als functie van het momentum p voor $\Lambda = 10^4$. Op de linkse figuur staan deze voorgesteld op een logaritmische schaal, en rechts op een lineaire schaal.



Figuur 18: Voorstelling van de scattering amplitudes voor de separabele potentiaal (rood), de separabele potentiaal in de contact limiet (groen), en het EFT model met contact interactie (blauw) als functie van het momentum p voor $\Lambda = 10^5$. Op de linkse figuur staan deze voorgesteld op een logaritmische schaal, en rechts op een lineaire schaal.

5.4.3 Bijkomende opmerkingen

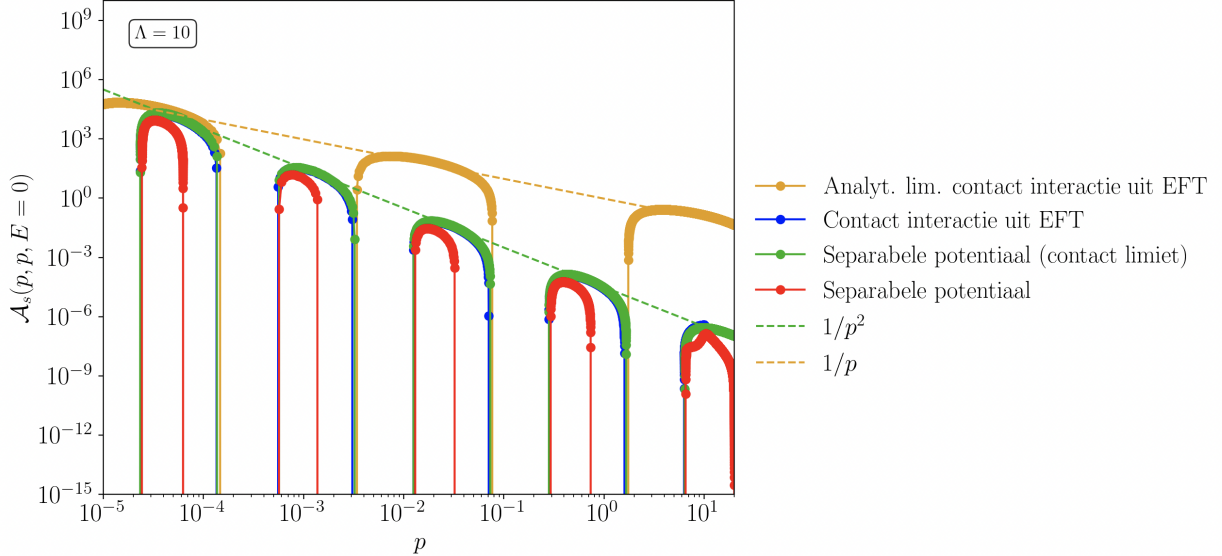
In deze laatste subsectie zullen nog twee laatste onduidelijkheden/inconsistenties aangehaald worden in verband met de verstrooiingsamplitudes. Herinner uit sectie (5.3) dat er in het EFT model met de contact interactie een asymptotische oplossing werd afgeleid in de limiet van $p \rightarrow \infty$. Analytisch

werd dan een uitdrukking bekomen voor de scattering amplitude, welke werd gegeven door

$$\mathcal{A}_s(p, k, E) \rightarrow \frac{(1 + s_0^2)^{1/2} \Lambda_*^{-is_0}}{2} p^{-1+is_0} + \frac{(1 + s_0^2)^{1/2} \Lambda_*^{is_0}}{2} p^{-1-is_0}. \quad (5.85)$$

Deze kan nu ook mee vertoond worden in de figuren van de verstrooiingsamplitudes, wat in figuur 19 staat voorgesteld voor $\Lambda = 10$ als voorbeeld. Hier werd gekozen om enkel de volledig logaritmische schaling af te beelden, aangezien hier de grootste verschillen op zijn te zien. De drie grote contrasten die hier duidelijk zijn met de andere drie modellen, zijn de amplitude, de periode en de breedte. De periode van de analytische limiet is hier exact gelijk aan $2 \times$ de periode van de EFT scattering amplitude. De breedte van de gele curve is benaderend de helft van zijn periode en dus gelijk aan de periode van de rode, groene en blauwe curve.

Voor het verschil in amplitude duidelijker te kunnen zien, zijn er twee verschillende fits gemaakt in deze figuur. De fit die het beste past aan de analytische limiet is een omgekeerd evenredig verband met het momentum, $\mathcal{A}_s \propto 1/p$. Voor de andere drie grafieken is dit een ander verband, namelijk $\mathcal{A}_s \propto 1/p^2$. Al deze factoren 2 die verschillen kunnen verschillende verklaringen hebben. Een eerste verklaring kan zijn dat er nog een $\times 2$ ontbreekt in de machten van het momentum in formule (5.85). Een andere verklaring zou kunnen zijn dat de asymptotische afgeleid werd voor $p \rightarrow \infty$ en $\Lambda \rightarrow \infty$, en hier zitten we niet in dat regime, echter wel $1/a \ll p$.



Figuur 19: Voorstelling van de scattering amplitudes voor de separabele potentiaal (rood), de separabele potentiaal in de contact limiet (groen), het EFT model met contact interactie (blauw), en de anaytische limiet van de EFT (geel) als functie van het momentum p voor $\Lambda = 10$. Hierbij zijn beide assen logaritmisch geschaald.

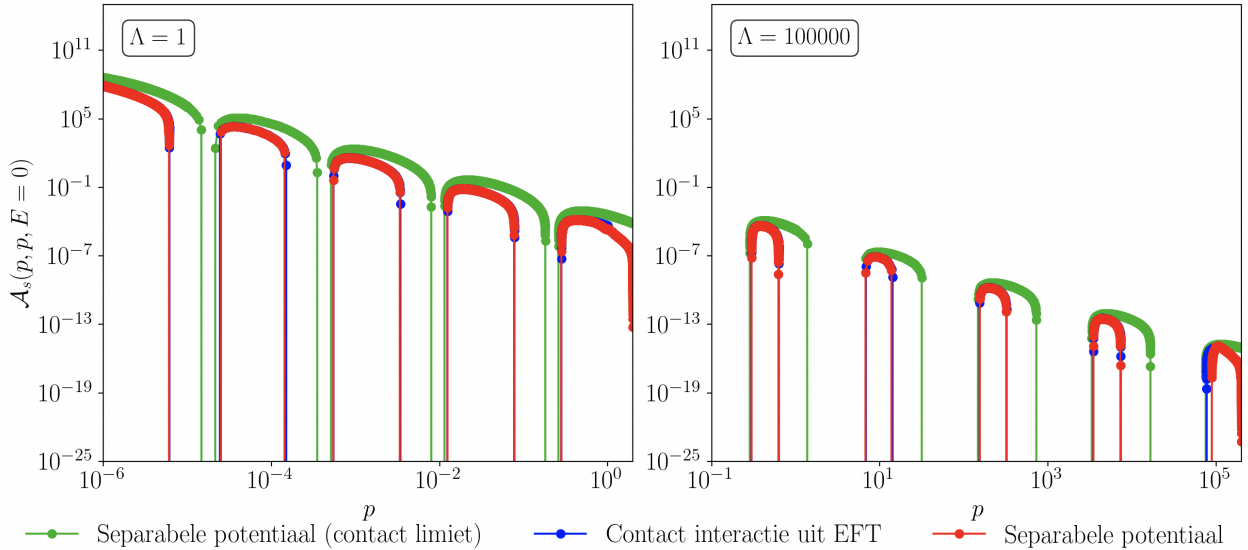
De tweede opmerking heeft te maken met de Efimov trimers. Herinner dat in subsectie (5.4.1) de golfgetallen van de grondtoestand Efimov trimer werden bepaald voor alle nodige waarden van de cutoff. Nadien werden dan de getallen Λ_* bepaald welke nodig waren voor $H(\Lambda)$ te berekenen in de contact versie van de EFT. Deze laatste werden bepaald via het verband [2]

$$\Lambda_* = 2.62 \times \kappa_*^{(n)} e^{n\pi/s_0}. \quad (5.86)$$

Echter is deze factor 2.62 een numerieke constante [2, 26, 34]. Deze constante stelt dus een schaling voor tussen de golfgetallen en de getallen Λ_* . De waarde van deze constante zorgt er dus voor dat nu het EFT model en de contact limiet van het separabele model bijna identiek worden voor hoge waarden van de cutoff. Echter zouden wij deze parameter opnieuw kunnen definiëren opdat het EFT model wel zou fitten aan ons model voor de separabele interactie. Dit is getest geweest, waaruit bleek dat de schalingsfactor die nodig was gelijk was aan benaderend de helft van de originele schalingsfactor. Dus voor ons model wordt er volgende verband gevonden voor de relatie tussen Λ_* en κ_* :

$$\Lambda_* = 1.35 \times \kappa_*^{(n)} e^{n\pi/s_0} \approx 2.62/2 \times \kappa_*^{(n)} e^{n\pi/s_0}. \quad (5.87)$$

Wanneer deze relatie wordt gebruikt om de effectieve veldentheorie resultaten te plotten, dan zien de resultaten eruit zoals in figuur 20. Nu overlappen de separabele potentiaal (rode grafiek) en het EFT model met de contact interactie (blauwe grafiek). Dit past zowel voor kleine cutoff waarden $\Lambda = 1$ op de linkse figuur, als voor de grote waarden $\Lambda = 10^5$ op de rechtse figuur. Dit werd ook nagekeken voor cutoffs tussen deze twee waarden, waar ook deze overeenkomst goed naar voor komt. Dit toont dus aan dat er met deze extra factor 2 een bijna perfecte overeenkomst bestaat tussen het model met de separabele potentiaal en de methode met de contact interactie uit de effectieve veldentheorie. We kunnen dus concluderen dat ons uitgewerkte model goed werkt en de resultaten reproduceert uit de literatuur.



Figuur 20: Voorstelling van de scattering amplitudes voor de separabele potentiaal (rood), de separabele potentiaal in de contact limiet (groen), en het EFT model met contact interactie (blauw) als functie van het momentum p voor $\Lambda = 1$ links en $\Lambda = 10^5$ rechts. Op beide figuur staan deze voorgesteld op een logaritmische schaal.

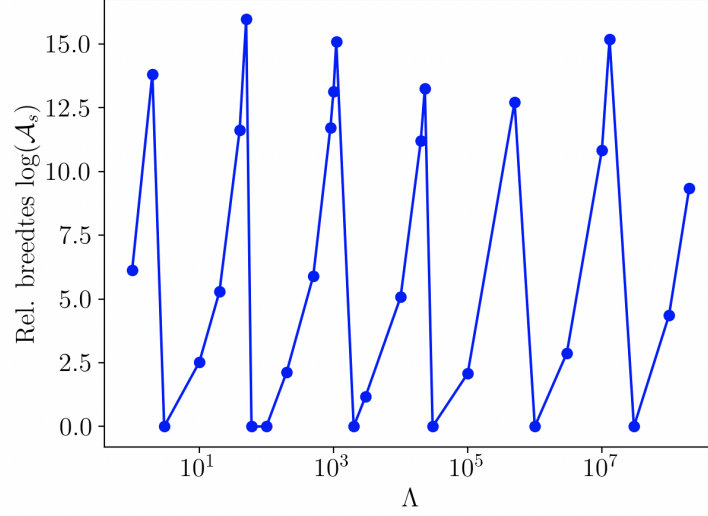
6 Conclusie en Outlook

Het doel van deze thesis was om te onderzoeken hoe effectieve drie-deeltjes interacties consistent ingebouwd zitten in drie-deeltjes vergelijkingen met twee-deeltjes separabele interacties, en hoe dit vergelijkt met contact interacties in EFT's. Om dit doel te bereiken zijn de STM-vergelijkingen herschreven met een separabele potentiaal. Dit zijn vergelijkingen welke het gedrag van drie-interagerende deeltjes beschrijven. Hiervoor werd via een Faddeev decompositie gewerkt waarbij werd beschouwd dat de drie deeltjes alleen via paarsgewijze interacties met elkaar interageren. Hieruit kon dan een integraalvergelijking afgeleid worden om uiteindelijk een formule te vinden voor de drie-deeltjes verstrooiingsamplitude $\mathcal{A}_s(p, k, E)$. De separabele potentiaal die hier werd gebruikt zorgde ervoor dat er via vormfactoren een momentum cutoff Λ werd geïntroduceerd, om divergenties en de nood aan regularisatie en renormalisatie te vermijden.

Vervolgens werd een kwalitatieve vergelijking gemaakt tussen het model uit de effectieve veldentheorie waarbij werd beschouwd dat deeltjes alleen interageren via een contact interactie, en het model met de separabele interacties. Dit werd stap voor stap opgebouwd door eerst te beginnen op het level van twee-deeltjes welke botsen en terug uiteengaan. Nadien werd dit uitgebreid tot een twee-kanalen model, waarbij extra rekening werd gehouden met het feit dat de deeltjes ook een gebonden toestand kunnen vormen in een ander interactie kanaal via het Feshbach mechanisme. Hierna werd overgegaan naar de verstrooiing tussen drie deeltjes met effectieve drie-deeltjes interacties volgend uit de paarsgewijze interacties, waarbij een analogie werd opgebouwd naar het twee-kanalen model.

De integraalvergelijking voor de verstrooiingsamplitudes van het separabel model werd eerst analytisch afgeleid, en nadien vergeleken met het EFT model van H.-W. Hammer en E. Braaten [2]. In de limiet dat deze gelijk zijn, werd hieruit een relatie afgeleid van de drie-deeltjes interactiesterke g_3 als functie voor de twee-deeltjes interactiesterke g_2 en de vormfactoren van de separabele potentiaal. Verder werd ook de analytische asymptotische oplossing vergeleken tussen de twee modellen, in de limiet van $\Lambda \rightarrow \infty$ en $p \rightarrow \infty$, waarbij beiden reduceerden tot eenzelfde vorm. Nadien werd een numerieke vergelijking tussen de modellen gemaakt. Hiervoor werden eerst in het unitaire regime de drie-deeltjes parameters κ_* afgeleid als functie van de cutoff Λ . Deze drie-deeltjes parameters komen overeen met de golfgetallen van de grondtoestand Efimov trimer op het unitaire punt ($1/a \rightarrow 0$), en zijn via een numerieke constante gerelateerd aan de term $H(\Lambda)$ in het EFT model. Uit onze analyse is gebleken dat $H(\Lambda)$ een constante waarde aanneemt. Aangezien de drie-deeltjes interactiesterke g_3 lineair schaal met $H(\Lambda)/\Lambda^2$, volgt hieruit dat voor grote waarden van de cutoff de effectieve drie-deeltjes term geen bijdrage meer zal leveren, en de EFT correct reduceert tot de contact limiet met enkel twee-deeltjes interacties.

In de numerieke vergelijking werden er drie verschillende scattering amplitudes geanalyseerd: de gene voor de separabele potentiaal, de contact limiet voor de separabele potentiaal met $\Lambda \rightarrow \infty$, en het EFT model met contact interacties. De analyse is uitgevoerd in het sterk wisselwerkende regime waarbij $1/a \ll p \ll \Lambda$, met p het momentum van het vrije deeltje en $-p$ het momentum van het diatoom waarmee dit deeltje scattert. Hierbij is de waarde van de cutoff gevarieerd van 1 tot 10^5 . Bij al deze waarden kwamen de resultaten verkregen met de EFT en verkregen met de contact limiet van de separabele potentiaal bijna perfect overeen. De separabele grafiek gaf altijd een verschillende breedte dan de andere twee grafieken, maar wel altijd eenzelfde periode wanneer de logaritmische schaling werd gebruikt. Dit komt omdat de scattering amplitudes oscillerende functies zijn, die zowel positief als negatief kunnen worden. De verschillen in de waarde rond waar $\mathcal{A}_s$ oscilleert leiden dan op log-log schaal tot verschillende breedtes van de pieken van de verstrooiingsamplitude (waar



Figuur 21: Verband tussen de relatieve breedte van elke piek in het logaritme van de verstrooiingsamplitude met de separabele potentiaal als functie van de cutoff Λ .

$\mathcal{A}_s$ dus positief is). De separabele potentiaal en de contact curves oscilleren dus rond een ander middelpunt, maar doen dit wel met eenzelfde periode. Verder werd uit deze figuren ook afgeleid dat de breedte van $\log(\mathcal{A}_s)$ oscilleert als functie van de cutoff. Hier is verder ook op zoek gegaan naar welke schalingsfactor er exact nodig was tussen κ_* en $H(\Lambda)$ opdat de breedtes van de EFT curve en de separabele potentiaal overeen zouden komen. Deze laatste bepaalt namelijk welke breedte de EFT curve zal hebben. Hieruit werd bepaald dat onze ideale factor gelijk is aan benaderend de helft van de originele schalingsfactor uit [2].

Tot slot werd ook nog gevonden dat de verstrooiingsamplitudes voor zowel de separabele potentiaal als de contact potentiaal uit de EFT afvallen met een factor $1/p^2$. Dit is anders dan de $1/p$ schaling gevonden in referentie [2]. Echter, deze schaling $1/p$ is enkel afgeleid in de limiet $p \rightarrow \infty$, en zal zodoende elke hogere schaling $p^{-\alpha}$ van de scattering amplitude met $\alpha > 1$ onderdrukken. Het feit dat alle modellen schalen zoals $1/p^2$ in het regime $1/a \ll p \ll \Lambda$ geeft ons vertrouwen in de juistheid van onze resultaten, en biedt een interessante optie om een analytische schaling van de verstrooiingsamplitude af te leiden buiten de limiet $p \rightarrow \infty$.

In deze thesis werd dus aangetoond dat de drie-deeltjes verstrooiingsamplitude berekend met een separabele potentiaal consistente resultaten geeft met de amplitude als berekend kan worden uit een effectieve veldentheorie, zonder een extra nood aan regularisatie en renormalisatie. Toch zijn er nog enkele open vragen achter gebleven die nog extra onderzocht kunnen worden. Zoals eerder vermeld werd er dus een oscillerend verband gevonden tussen de breedtes van de verstrooiingsamplitudes en de cutoff Λ . Echter in deze thesis werd dit maar bekeken voor zes verschillende waarden van Λ . In figuur 21 staat het verband weergegeven voor extra toegevoegde waarden.

Hieruit is het dus heel duidelijk dat de relatieve breedte wisselt tussen een factor 0 tot een factor ≈ 15 . Wanneer nu de verhouding wordt genomen van de cutoff waarden waarbij de breedtes maximaal worden, dan komt hieruit een factor van benaderend 22. Met extra precisie kan dit een interessant punt zijn om in meer detail te bekijken, en of dit eventueel convergeert naar een waarde van 22.7 welke overeenkomt met de Efimov schaling. Verder kan ook de analytische asymptotische oplossing nog meer onderzocht worden en de overeenkomstige verschillen in amplitude afname.

Een andere interessante onderzoeksrichting is het uitbreiden van de numerieke analyse naar het in acht nemen van de effectieve range R_{eff} . Deze werden al in de meeste uitdrukking mee geïmplementeerd, maar werden in het programma nog niet mee in rekening gebracht, ook om een vergelijking te maken met [2] waar de effectieve range in eerste instantie buiten beschouwing werd gelaten in het bepalen van de drie-deeltjes verstrooiingsamplitude. Deze uitbreiding zou heel interessant kunnen zijn voor bijvoorbeeld twee-componenten Fermi gassen en bij Cooper paren in supergeleiders. Tot slot hebben we dit programma alleen getest in het sterk wisselwerkende regime, en dus voor een enkele waarde van de verstrooiingslengte. Hier zou natuurlijk ook een uitbreiding op gemaakt kunnen worden, aangezien de analytische uitwerking van de verstrooiingsamplitude met de separabele potentiaal geldig is voor arbitraire waarden van de verstrooiingslengte. Door deze aan te passen kan de theorie uitgebreid worden van het sterk-interagerende regime naar het zwak-interagerende regime, waarvoor ook een EFT kan geformuleerd worden [71–73].

Samengevat tonen de resultaten in deze thesis aan dat effectieve drie-deeltjes interacties op een inzichtelijke en consistente manier gemodelleerd kunnen worden met behulp van een separabele potentiaal. Er blijven uiteraard nog veel mogelijkheden tot uitbreiding over, maar de eerste resultaten die hieruit voortkomen vormen dus een interessante basis voor verder onderzoek.

Referenties

- [1] C. J. Pethick and H. Smith. *Bose–Einstein Condensation in Dilute Gases*. Cambridge University Press, 2 edition, 2008.
- [2] Eric Braaten and H.-W. Hammer. Universality in few-body systems with large scattering length. *Physics Reports*, 428(5):259–390, 2006.
- [3] D. S. Petrov, C. Salomon, and G. V. Shlyapnikov. Weakly bound dimers of fermionic atoms. *Phys. Rev. Lett.*, 93:090404, Aug 2004.
- [4] E. Nielsen, D.V. Fedorov, A.S. Jensen, and E. Garrido. The three-body problem with short-range interactions. *Physics Reports*, 347(5):373–459, 2001.
- [5] J. J. Sakurai and Jim Napolitano. *Modern Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, 3 edition, 2020.
- [6] Pascal Naidon and Shimpei Endo. Efimov physics: a review. *Reports on Progress in Physics*, 80(5):056001, 2017.
- [7] T. K. Lim, Sister Kathleen Duffy, and William C. Damer. Efimov state in the ^4He trimer. *Phys. Rev. Lett.*, 38:341–343, 1977.
- [8] T. Kraemer, M. Mark, P. Waldburger, J. G. Danzl, C. Chin, B. Engeser, A. D. Lange, K. Pilch, A. Jaakkola, H. C. Nägerl, and R. Grimm. Evidence for efimov quantum states in an ultracold gas of caesium atoms. *Nature*, 440(7082):315–318, 2006.
- [9] Chen Ji, Eric Braaten, Daniel R. Phillips, and Lucas Platter. Universal relations for range corrections to efimov features. *Phys. Rev. A*, 92:030702, 2015.
- [10] Vitaly Efimov. Energy levels arising from resonant two-body forces in a three-body system. *Physics Letters B*, 33(8):563–564, 1970.
- [11] Vitaliy N Efimov. Weakly bound states of three resonantly interacting particles. *Sov. J. Nucl. Phys.*, 12:589, 1971.
- [12] Denise J. M. Ahmed-Braun. A consistent coupled-channels description of feshbach resonances through two- three- and many-body systems. Master’s thesis, Technische Universiteit Eindhoven, 2018.
- [13] José P D’Incao. Few-body physics in resonantly interacting ultracold quantum gases. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 51(4):043001, 2018.
- [14] M. Zaccanti, B. Deissler, C. D’Errico, M. Fattori, M. Jona-Lasinio, S. Müller, G. Roati, M. Inguscio, and G. Modugno. Observation of an efimov spectrum in an atomic system. *Nature Physics*, 5(8):586–591, 2009.
- [15] Jacques Tempere. *Superfluidity and Superconductivity*. Universiteit Antwerpen, 2024.
- [16] L. P. (Lev Petrovich) Pitaevskii and S. Stringari. *Bose-Einstein condensation / Lev Pitaevskii, Sandro Stringari*. Oxford science publications. Clarendon Press, Oxford ;, 2003.
- [17] W. Ketterle and M. W. Zwierlein. Making, probing and understanding ultracold fermi gases. *La Rivista del Nuovo Cimento*, 31:247–422, 2008.

- [18] Immanuel Bloch, Jean Dalibard, and Wilhelm Zwerger. Many-body physics with ultracold gases. *Rev. Mod. Phys.*, 80:885–964, Jul 2008.
- [19] Stefan Leupold. *Quantum Chromodynamics and Effective Field Theory*. Uppsala University, 2023.
- [20] C. Ji, D. R. Phillips, and L. Platter. Beyond universality in three-body recombination: An effective field theory treatment. *Europhysics Letters*, 92(1):13003, 2010.
- [21] Chen Ji and Daniel R. Phillips. Effective field theory analysis of three-boson systems at next-to-next-to-leading order. *Few-Body Systems*, 54(12):2317–2355, 2013.
- [22] S. Dietz, H.-W. Hammer, S. König, and A. Schwenk. Three-body resonances in pionless effective field theory. *Phys. Rev. C*, 105:064002, Jun 2022.
- [23] H.-W. Hammer and R.J. Furnstahl. Effective field theory for dilute fermi systems. *Nuclear Physics A*, 678(3):277–294, 2000.
- [24] Betzalel Bazak, Moti Eliyahu, and Ubirajara van Kolck. Effective field theory for few-boson systems. *Phys. Rev. A*, 94:052502, 2016.
- [25] D. S. Petrov. Three-boson problem near a narrow feshbach resonance. *Phys. Rev. Lett.*, 93:143201, 2004.
- [26] P.F. Bedaque, H.-W. Hammer, and U. van Kolck. The three-boson system with short-range interactions. *Nuclear Physics A*, 646(4):444–466, 1999.
- [27] David B. Kaplan, Martin J. Savage, and Mark B. Wise. Two-nucleon systems from effective field theory. *Nuclear Physics B*, 534(1):329–355, 1998.
- [28] Michael E. Peskin and Daniel V. Schroeder. *An Introduction to quantum field theory*. Addison-Wesley, Reading, USA, 1995.
- [29] Gerald D. Mahan. *Many Particle Physics, Third Edition*. Physics of Solids and Liquids. Springer New York, NY, New York, 2 edition, 1990.
- [30] Jacques Tempere. *Kwantumveldentheorie*. Universiteit Antwerpen, 2024.
- [31] Gert Roepstorff. *Path Integral Approach to Quantum Physics: An Introduction*. Theoretical and Mathematical Physics. Springer Berlin, Heidelberg, New York, 1 edition, 1994.
- [32] David B. Kaplan, Martin J. Savage, and Mark B. Wise. A new expansion for nucleon-nucleon interactions. *Physics Letters B*, 424(3):390–396, 1998.
- [33] Steven Weinberg. *The Quantum theory of fields. Vol. 1: Foundations*. Cambridge University Press, 6 2005.
- [34] P. F. Bedaque, H.-W. Hammer, and U. van Kolck. Renormalization of the three-body system with short-range interactions. *Phys. Rev. Lett.*, 82:463–467, 1999.
- [35] Joseph Polchinski. Effective field theory and the Fermi surface. In *Theoretical Advanced Study Institute (TASI 92): From Black Holes and Strings to Particles*, pages 0235–276, 6 1992.
- [36] Hans-Werner Hammer and Lucas Platter. Efimov physics from a renormalization group perspective. *Philosophical transactions. Series A, Mathematical, physical, and engineering sciences*, 369:2679–700, 07 2011.

- [37] U. van Kolck. Effective field theory of short-range forces. *Nuclear Physics A*, 645(2):273–302, 1999.
- [38] G. P. Lepage. How to renormalize the Schrodinger equation. In *8th Jorge Andre Swieca Summer School on Nuclear Physics*, pages 135–180, 2 1997.
- [39] Paulo Bedaque and U. van Kolck. Effective field theory for few-nucleon systems. *Annual Review of Nuclear and Particle Science*, 52, 03 2002.
- [40] C. P. Burgess. *Introduction to Effective Field Theory: Thinking Effectively about Hierarchies of Scale*. Cambridge University Press, 2020.
- [41] A. L. Fetter and J. D. Walecka. *Quantum Theory of Many-Particle Systems*. McGraw-Hill, Boston, 1971.
- [42] Denise J. M. Ahmed-Braun. *From few- to many-body physics in strongly interacting quantum gases : A lot about the little and a little about the lot*. PhD thesis, 2023.
- [43] D. J. Ernst, C. M. Shakin, and R. M. Thaler. Separable representations of two-body interactions. *Phys. Rev. C*, 8:46–52, Jul 1973.
- [44] Paulus M. A. Mestrom. Efimov physics for non-separable finite-range interactions. Master’s thesis, Technische Universiteit Eindhoven, 2017.
- [45] Cheng Chin, Rudolf Grimm, Paul Julienne, and Eite Tiesinga. Feshbach resonances in ultracold gases. *Rev. Mod. Phys.*, 82:1225–1286, 2010.
- [46] Thorsten Köhler, Krzysztof Góral, and Paul S. Julienne. Production of cold molecules via magnetically tunable feshbach resonances. *Rev. Mod. Phys.*, 78:1311–1361, Dec 2006.
- [47] Eddy Timmermans, Paolo Tommasini, Mahir Hussein, and Arthur Kerman. Feshbach resonances in atomic bose–einstein condensates. *Physics Reports*, 315(1):199–230, 1999.
- [48] S. Knoop, F. Ferlaino, M. Mark, M. Berninger, H. Schöbel, H. C. Nägerl, and R. Grimm. Observation of an efimov-like trimer resonance in ultracold atom–dimer scattering. *Nature Physics*, 5(3):227–230, 2009.
- [49] Jia Wang, J. P. D’Incao, B. D. Esry, and Chris H. Greene. Origin of the three-body parameter universality in efimov physics. *Phys. Rev. Lett.*, 108:263001, Jun 2012.
- [50] John R. Taylor. *Scattering Theory: The Quantum Theory of Nonrelativistic Collisions*. John Wiley & Sons, Inc., New York, 1972.
- [51] Bart Bartoens. *Gevorderde Kwantummechanica*. Universiteit Antwerpen, 2024.
- [52] George B. Arfken, Hans J. Weber, and Frank E. Harris. Chapter 14 - bessel functions. In *Mathematical Methods for Physicists*, pages 643–713. Academic Press, Boston, seventh edition, 2013.
- [53] Jacques Tempere. *Solid State Physics II*. Universiteit Antwerpen, 2024.
- [54] Richard Phillips Feynman and Albert Roach Hibbs. *Quantum mechanics and path integrals*. International series in pure and applied physics. McGraw-Hill, New York, NY, 1965.
- [55] Lûdvig Dmitrievîch Faddeev and Stanislav Petrovich Merkuriev. *Quantum scattering theory for several particle systems*, volume 11. Springer Science & Business Media, 2013.

- [56] Aleksei G. Sitenko. *Scattering Theory*. Springer Berlin, Heidelberg, 1 edition, 1991.
- [57] Paulus M. A. Mestrom. *Three-body collisions in dilute quantum fluids*. Phd thesis, Applied Physics and Science Education, September 2021.
- [58] S. J. J. M. F. Kokkelmans, J. N. Milstein, M. L. Chiofalo, R. Walser, and M. J. Holland. Resonance superfluidity: Renormalization of resonance scattering theory. *Phys. Rev. A*, 65:053617, 2002.
- [59] B. Marcelis, E. G. M. van Kempen, B. J. Verhaar, and S. J. J. M. F. Kokkelmans. Feshbach resonances with large background scattering length: Interplay with open-channel resonances. *Phys. Rev. A*, 70:012701, Jul 2004.
- [60] A. J. Moerdijk, B. J. Verhaar, and A. Axelsson. Resonances in ultracold collisions of ^6Li , ^7Li , and ^{23}Na . *Phys. Rev. A*, 51:4852–4861, Jun 1995.
- [61] J. van de Kraats, D. J. M. Ahmed-Braun, V. E. Colussi, and S. J. J. M. F. Kokkelmans. Resonance triplet dynamics in the quenched unitary bose gas. *Phys. Rev. Res.*, 6:L012056, Mar 2024.
- [62] Jasper van de Kraats. Van der waals landscape of the effective efimovian three-body potential from the broad to narrow feshbach resonance limit. Master’s thesis, Technische Universiteit Eindhoven, 2021.
- [63] L. D. Faddeev. Scattering theory for a three particle system. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, 39:1459–1467, 1960.
- [64] EO Alt, P Grassberger, and W Sandhas. Reduction of the three-particle collision problem to multi-channel two-particle lippmann-schwinger equations. *Nuclear Physics B*, 2(2):167–180, 1967.
- [65] W Glöckle. *The quantum mechanical few-body problem*. Texts and monographs in physics. Springer, Berlin, 1983.
- [66] P. M. A. Mestrom, V. E. Colussi, T. Secker, and S. J. J. M. F. Kokkelmans. Scattering hypervolume for ultracold bosons from weak to strong interactions. *Phys. Rev. A*, 100:050702, 2019.
- [67] V.V. Komarov and Anna M. Popova. Break-up of a deuteron by a nucleon. *Nuclear Physics*, 54:278–294, 1964.
- [68] GS Danilov. On the three-body problem with short-range forces. *Sov. Phys. JETP*, 13(349):3, 1961.
- [69] Milorad Milosevic. *Numeric Methods*. Universiteit Antwerpen, 2022.
- [70] L. H. Thomas. The interaction between a neutron and a proton and the structure of h^3 . *Phys. Rev.*, 47:903–909, Jun 1935.
- [71] T. D. Lee, Kerson Huang, and C. N. Yang. Eigenvalues and eigenfunctions of a bose system of hard spheres and its low-temperature properties. *Phys. Rev.*, 106:1135–1145, Jun 1957.
- [72] Luca Salasnich. Self-consistent derivation of the modified gross-pitaevskii equation with lee–huang–yang correction. *Applied Sciences*, 8:1998, 10 2018.

- [73] D. S. Petrov. Quantum mechanical stabilization of a collapsing bose-bose mixture. *Phys. Rev. Lett.*, 115:155302, Oct 2015.

