

Universiteit
Antwerpen

FACULTEIT WETENSCHAPPEN
DEPARTEMENT FYSICA
ACADEMIEJAAR 2017-2018

Vortices in fermionische superfluida bij componentsgewijze rotatie

Timour Ichmoukhamedov

Promotor:
Prof. Dr. Jacques Tempere

Proefschrift ter verkrijging van de graad van
MASTER IN DE FYSICA.

Abstract

Fermionic superfluids have recently become of great interest in the field of ultracold atomic physics for their great range of modifiable experimental parameters compared to other ultracold systems such as Bose-Einstein condensates or superconductors. Experimentalists are able to tune the effective scattering length across the BCS-BEC crossover, can introduce spin imbalance by modifying the number of atoms in each hyperfine state and are free to consider many other degrees of freedom attained from the fermionic substructure of the correlation pairs. In this master thesis the effect of one possible additional degree of freedom in Fermi gases will be considered in the context of rotation of the condensate where only one component of the gas is subjected to a rotating potential.

Since all of the works have thus far considered normal rotation of both components, a modification of the current theoretical models is required to allow for componentwise rotation. To do this, the derivation of the effective field theory in the path integral formalism proposed at TQC is considered while using different rotating frames for the respective components. After performing the Hubbard-Stratonovich transformation, integrating out the fermionic fields and expanding the action up to second order gradients in the kinetic energy terms and first order in the direct rotational terms, a free energy as a functional of a bosonic field is obtained. To analytically perform the fermionic path integrals rotation has to be considered in the local density approximation (LDA), which assumes that macroscopic changes occur over larger length scales than the length scales associated with the microscopic correlation effects. This implies that the LDA is preferably studied in the unitary to BEC regimes.

This free energy is subsequently used to study the effects of rotation of only one spin component on vortices in the fermionic superfluid and to compare them with the results for ordinary rotation of both components. As the study of vortices requires a set of background parameters for the energy gap and the chemical potential, some separate attention is given to the zeroth-order term of the free energy and the solutions of its gap and number equations. The full free energy is then utilized with a variational model in the study of the structure of a single vortex for both types of rotation in the unitary regime.

The solutions of the gap and number equations show that the energy gap behaves qualitatively in a similar way for both types of rotation and that superfluidity only vanishes at a certain upper critical frequency. This upper critical frequency for the rotation of a single component surprisingly appears to be higher than the critical frequency for normal rotation. The behaviour of the vortex structure shows differences between the two types of rotation as well. The initial critical frequency at which a vortex appears is higher for single component rotation which is in agreement with the previous remark about the upper critical frequency. The most notable result is perhaps the size of the vortex core, which is significantly larger for the rotation of a single component. This result is finally interpreted in a semi classical approximation as an increase of the centrifugal effect on the level of the fermions in the pairs.

Samenvatting

In deze masterthesis worden fermionische atomaire gassen bestudeerd die uit twee verschillende componenten met een verschillende spin bestaan. Wanneer een atomair gas bestaande uit fermionen tot op temperaturen in de buurt van nul kelvin afgekoeld wordt, bestaat er een kritische temperatuur waaronder het gas eigenaardig gedrag begint te vertonen. De atomen met tegengestelde spin vormen dan door de onderlinge interactie correlatieparen. Deze paren kunnen onder bepaalde omstandigheden als nieuwe type deeltjes beschouwd worden die geen puntvormig karakter meer hebben door de gemiddelde afstand tussen de atomen in een paar. Hierdoor kan het atomaire gas in een superfluïde fase overgaan die kwantummechanische eigenschappen zoals stromen zonder wrijving, kwantisatie van circulatie en veel andere effecten op een macroscopische schaal vertoont. Dit is precies ook wat er met de elektronen in een supergeleider gebeurt waardoor elektrische geleiding zonder weerstand kan plaatsvinden. De reden waarom deze fermionische atomaire gassen bijzonder interessant zijn, is omdat in experimenten de afzonderlijke spincomponenten van het gas waaruit de fermionische paren bestaan rechtsreeks te manipuleren zijn, wat bijvoorbeeld niet mogelijk is in supergeleiders. Dit geeft de mogelijkheid om verschillende fysische fenomenen te bestuderen in omstandigheden die hiervoor niet realiseerbaar waren in andere fysische systemen.

Een belangrijk fenomeen in verschillende ultrakoude systemen is het voorkomen van vortices die bestudeerd worden in de context van kritische magneetvelden bij supergeleiders en in de context van kwantumturbulentie bij Bose-Einstein condensatie. Vortices zijn draaikolken die bestaan uit een vortexkern van lagere dichtheid met daarrond een circulerend snelheidsveld en worden in fermionische superfluïda geïnduceerd met behulp van een externe rotatie van het condensaat. In theoretische studies en experimenten werd tot nu toe enkel beschouwd hoe de vortices zich gedragen wanneer alle atomen in het gas geroteerd worden. In deze masterthesis wordt er onderzocht hoe de eigenschappen van een vortex veranderen wanneer enkel één spincomponent van het gas geroteerd wordt.

Om dit te doen worden eerst bestaande theoretische beschrijvingen om vortices bij normale rotatie van beide componenten te beschrijven aangepast om deze componentsgewijze rotatie mee te nemen. Deze theoretische modellen worden vervolgens toegepast om de vortexstructuur voor beide typen van rotatie met elkaar te vergelijken. De resultaten indiceren dat vortices bij de rotatie van enkel één spincomponent een aanzienlijk grotere vortexkern hebben. Een semiklassieke interpretatie van dit resultaat lijkt erop te wijzen dat wanneer enkel één component geroteerd wordt, de centrifugale kracht in verhouding sterker wordt dan bij de rotatie van beide componenten.

Inhoudsopgave

Voorwoord	5
1 Inleiding	6
1.1 Historisch overzicht van ultrakoude gassen	6
1.2 Ultrakoude atomaire Fermi gassen	7
1.2.1 Interacties in Fermi gassen	7
1.2.2 BCS-BEC crossover	8
1.2.3 Experimentele realisatie	10
1.3 Vortices	10
1.4 Onderzoeksvragen	12
2 Ultrakoude Fermi gassen in een zadelpuntsbenadering	13
2.1 Grassmann padintegralen voor fermionische veel-deeltjes systemen	13
2.2 De rotatie incorporeren in de fermionische actie	14
2.3 Hubbard-Stratonovich transformatie en Nambu spinoren	16
2.4 De actie in reciproke ruimte	18
2.5 Zadelpuntsbenadering en de vrije energie	19
2.6 De bandkloofvergelijking en de vergelijking voor het deeltjesaantal	23
2.7 Resultaten zadelpuntsbenadering	24
2.7.1 Zonder rotatie	24
2.7.2 Rotatie in rekening brengen	28
3 Effectieve veldentheorie	33
3.1 Inleiding	33
3.2 Greense functies	34
3.3 Bijdrage van de eerste orde ruimtelijke expansie aan de actie	37
3.4 Substitutie van de Greense functies	41
3.5 Volledige actie en de vrije energie	47
4 Vortices	49
4.1 Een variationele aanpak	49
4.2 Analytische minimalisering	50
4.2.1 Coëfficiënten in zadelpuntsbenadering	50
4.2.2 Resultaten rotatie beide componenten	52
4.2.3 Resultaten rotatie van één component	53
4.3 De variationele golffunctie normaliseren	58
4.4 Numerieke minimalisatie van de vrije energie	59
4.4.1 De straal van de vortexkern	59
5 Discussie	63
5.1 Het effect van rotatie op de stabiliteit van de superfluïde toestand	63
5.2 Analyse van de deeltjesdichtheid, paarcorrelatielengte en lokale Fermi sferen	67
5.3 Interpretatie	71
5.3.1 Effect van rotatie op klassieke systemen	71
5.3.2 Semiklassieke interpretatie voor rotatie van fermionische paren	72

5.4 Een omzetting naar SI eenheden	74
6 Conclusie	76

Dankwoord

Deze masterthesis zou niet mogelijk zijn geweest zonder de hulp van een aantal mensen waar ik bijzonder dankbaar aan ben. Eerst en vooral zou ik graag mijn promotor Prof. Dr. Jacques Tempere willen bedanken voor alle hulp in de voorbije twee jaar, vanaf mijn eerste introductie tot de fysica van fermionische superfluida tot aan het nalezen van de laatste details van dit werk. Ook de talrijke discussies rond alle technische details waren uiterst waardevol. Verder wil ik graag iedereen aan de onderzoeksgroep TQC bedanken voor de wekelijkse bijeenkomsten waar ik steeds waardevol advies kreeg. Uiteindelijk nog een grote dank aan mijn familie en vrienden voor alle steun doorheen mijn masterstudie.

1 Inleiding

In de inleiding wordt het werk van deze masterthesis in een context geplaatst. Eerst wordt er een kort historisch overzicht gegeven van de typevoorbeelden van ultrakoude systemen zoals Bose-Einstein condensaten en supergeleiders. Deze bespreking wordt dan voortgezet met de specifieke nadruk op ultrakoude atomaire Fermi gassen en hoe ze verschillen van de andere besproken systemen. Vervolgens volgt een korte bespreking van vortices in ultrakoude gassen en hoe ze theoretisch beschreven worden. Uiteindelijk worden de onderzoeksvragen van deze masterthesis geformuleerd.

1.1 Historisch overzicht van ultrakoude gassen

Voor een groot domein van temperaturen, drukken en dichtheden worden veel gekende gassen zoals zuurstof, stikstof en helium allemaal goed beschreven door statistiek die gebaseerd is op de klassieke fysica. Zo blijkt de Maxwell-Boltzmann verdeling uit nog de 19de eeuw in deze gevallen goede voorspellingen te maken over de statistische eigenschappen van deze gassen en kan de klassieke hydrodynamica gebruikt worden om hier de dynamische eigenschappen van te bestuderen. Deze klassieke beschrijving is mogelijk omdat het kwantummechanische karakter van van een deeltje in een gas slechts belangrijk wordt bij lage temperaturen of hoge dichtheden. Zelfs een simpele redenering kan dit al bevestigen. De thermische de Broglie golflengte van een deeltje in een gas is de typische schaal waarop het kwantummechanische karakter van een deeltje een rol speelt en wordt gegeven door:

$$\lambda_{th} = \frac{h}{\sqrt{2\pi mkT}}. \quad (1.1)$$

Zolang de gemiddelde afstand r_s tussen de deeltjes groter is dan deze golflengte

$$r_s > \lambda_{th} \quad (1.2)$$

gedragen de deeltjes zich klassiek. Het volgt uit (1.1) dat door de temperatuur te verlagen deze ongelijkheid geschonden kan worden waardoor een klassieke beschrijving niet meer volstaat. Om de kwantummechanische correcties mee te nemen moet er onderscheid gemaakt worden tussen twee klassen van gassen - bosonische en fermionische gassen.

Voor een gas van niet interagerende bosonen werd de eerste statistische beschrijving die het kwantumkarakter van de deeltjes in rekening neemt geformuleerd door Bose en Einstein in 1924 [1]. Hierin wordt statistisch beschreven hoe op lage temperaturen de grondtoestand van het systeem een macroscopische bezetting aanneemt. Dit gaat gepaard met een overgang naar een nieuwe toestand van het gas die het Bose-Einstein condensaat (BEC) genoemd wordt. Gross en Pitaevskii bouwden voort op deze beschrijving door in 1961 voor interagerende bosonen een plaats-en tijdsafhankelijke ordeparameter in te voeren die aan een niet lineaire Schrödinger vergelijking moest voldoen [2], [3]. Deze vergelijking staat nu bekend als de Gross-Pitaevskii vergelijking en is in staat om een hele reeks aan verschijnselen in BEC's te beschrijven. Het heeft nog een lange tijd geduurd voor in 1995 een BEC voor het eerst experimenteel waargenomen werd door Cornell, Wieman [4], Ketterle [5]¹ en Hulet [6] in respectievelijk een gas van ⁸⁷Rb atomen, een gas van ²³Na atomen en een gas van ⁷Li atomen. Door de verbetering van experimentele technieken zijn er sindsdien verschillende fenomenen zoals vortices, solitonen en polaronen in BEC's waargenomen.

¹Waarvoor Cornell, Wieman en Ketterle in 2001 de Nobelprijs voor fysica kregen

De andere klasse van atomaire gassen zijn de Fermi gassen bestaande uit fermionen. Fermionen hebben een halfvallige spin en voldoen aan het exclusieprincipe van Pauli waardoor ze zich niet in dezelfde kwantumtoestand kunnen bevinden. Dit voorkomt condensatie van een macroscopisch aantal deeltjes in de grondtoestand zoals bij BEC's waardoor de fermionen op lage temperaturen achtereenvolgens de energetisch oplopende kwantumtoestanden moeten opvullen. Dit werd voor het eerst statistisch beschreven in 1926 door Dirac en Fermi [7] [8]. Volgens de Fermi-Dirac statistiek zou er bij Fermi-gassen geen sprake zijn van een condensatie in de grondtoestand.

Deze vraag van fermionische condensatie verscheen voor het eerst in een heel andere context - in metalen. In 1911 ontdekte Kamerlingh Onnes dat de resistiviteit van een metaal zoals kwik, tin of lood op lage temperaturen volledig verdween. Hiermee begon de zoektocht naar een theoretische beschrijving van supergeleiding die vandaag de dag nog steeds niet voorbij is. De eerste theorie die supergeleiding met behulp van een ordeparameter beschrijft, werd in 1950 voorgesteld door Ginzburg en Landau [9]. In deze theorie condenseert de normale toestand van elektronen in een supergeleidende toestand met een ordeparameter beschreven door de Ginzburg-Landau vergelijking. Hoewel het een correcte beschrijving van supergeleiding geeft in de buurt van de kritische temperatuur, geeft de theorie geen microscopische verklaring voor de condensatie van elektronen.

Het antwoord op deze vraag kwam enkele jaren later van Bardeen Cooper en Schrieffer die in 1957 de microscopische theorie van supergeleiding in twee artikels publiceerden [10] [11]. In deze theorie wordt aangetoond dat het uitwisselen van fononen tussen twee elektronen in een ionisch rooster de afstotende Coulomb-interactie kan overwinnen en aantrekkend kan werken. Deze aantrekkende interactie zorgt ervoor dat elektronen van tegengestelde spin gedelokaliseerde paren vormen. Het is belangrijk om op te merken dat deze Cooperparen slechts een representatie zijn van een correlatie effect. Een paar bestaat dus niet uit twee welbepaalde elektronen. Deze Cooperparen zijn bosonisch van aard en kunnen hierdoor wel condenseren in de grondtoestand. Niet veel later toonde Gorkov op een microscopisch niveau aan dat deze Cooperparen op lage temperatuur een Bose-Einstein condensatie ondergaan waarvan de ordeparameter precies aan de Ginzburg-Landau vergelijking voldoet [12].

1.2 Ultrakoude atomaire Fermi gassen

1.2.1 Interacties in Fermi gassen

Hoewel supergeleiding en condensatie van elektronen in metalen een mooie inleiding vormen voor ultrakoude atomaire Fermi gassen bestaan er toch grote verschillen tussen de twee fenomenen. Een eerste verschil is dat de atomen in het gas neutraal zijn en niet meer gebonden zijn aan een ionisch rooster zoals dat bij elektronen het geval is. Dit brengt veel experimentele complicaties van opsluiting en afkoeling met zich mee ten opzichte van supergeleiders maar zorgt ook voor vereenvoudigingen in de theoretische beschrijving. Een tweede verschil is dat de deeltjes nu niet meer spin $S = 1/2$ hebben maar meestal een grote halfvallige spin hebben ten gevolge van hyperfijn-interacties zoals $F = 9/2$. Experimenteel worden er hier m_F componenten uit geselecteerd voor de condensatie. In verder besproken experimenten worden bijvoorbeeld voor ^{40}K atomen de toestanden $|9/2, 9/2\rangle$ en $|9/2, 7/2\rangle$ uitgekozen. Op deze manier kan een Fermi gas dus uit twee of meerdere componenten bestaan. Verder kan het aantal atomen in elke hyperfijn-toestand experimenteel aangepast worden waardoor condensaten met een spin-onbalans bestudeerd kunnen worden.

Het grootste verschil ligt waarschijnlijk wel in de interacties tussen de fermionen. In een supergeleider bestaat het elektronengas op een achtergrond van een ionisch rooster. Een elektron kan fononische

excitatie creëren in het rooster, dit wordt beschreven door de Fröhlich Hamiltoniaan die voor deze fononinteractie een materiaalafhankelijke koppelingsconstante introduceert. Een ander elektron wordt door deze excitaties aangetrokken waardoor de Coulomb afstoting overbrugd kan worden om netto een aantrekkende interactie te geven. Dit effect is sterker voor elektronen met tegengestelde spin vanwege de afwezigheid van de exchange correlatie. De koppelingsconstante is in de meeste vaste stoffen gelegen in het zwakke tot intermediaire regime en kan niet experimenteel aangepast worden.

Voor atomaire gassen is de situatie anders. De interactie tussen de fermionische atomen wordt beschreven door de interatomaire potentiaal die op grote afstanden aantrekkend en op kleine afstanden afstotend is. Omdat de bestudeerde Fermi gassen erg ijl zijn en zich op een lage temperatuur bevinden zijn de gemiddelde interatomaire afstanden veel groter dan de dracht van de interatomaire potentiaal en zijn de energieën van de botsingen erg laag. Hierdoor is het mogelijk om de interactie onafhankelijk van de vorm van de potentiaal te beschrijven door enkel de s-golf verstrooiing te beschouwen. De interactiepotentiaal kan in dit geval door een contactpotentiaal met een enkele interactieparameter g gemodelleerd worden:

$$V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = g\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (1.3)$$

Na een renormalisatieprocedure kan deze interactieparameter gerelateerd worden aan de verstrooiingslengte a_s :

$$\frac{1}{g} = \frac{m}{4\pi\hbar^2 a_s} - \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{m}{\hbar^2 k^2}. \quad (1.4)$$

In Fermi gassen kan deze verstrooiingslengte experimenteel aangepast worden met behulp van Feshbach resonanties [13]. Hierbij kunnen verschillende verstrooiingskanalen onder de invloed van een magnetisch veld op een bepaalde kritische waarde B_0 van het veld in resonantie gebracht worden. Rond de resonantie is de verstrooiingslengte a een sterk variabele functie van het magnetisch veld B , gegeven door:

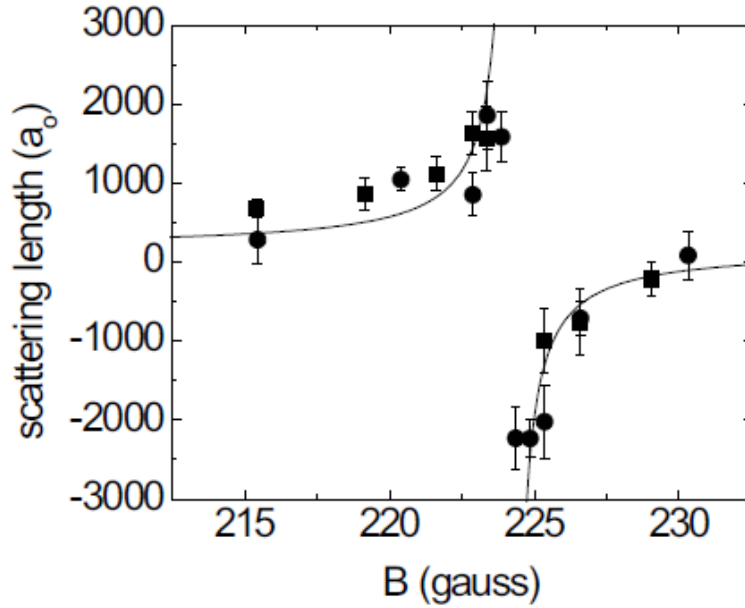
$$a(B) = a_{bg} \left(1 - \frac{\Delta B}{B - B_0} \right). \quad (1.5)$$

Hierbij is ΔB de karakteristieke breedte van de resonantie en a_{bg} is de achtergrondwaarde van de verstrooiingslengte zonder resonantie. Dit wordt weergegeven in figuur (1).

1.2.2 BCS-BEC crossover

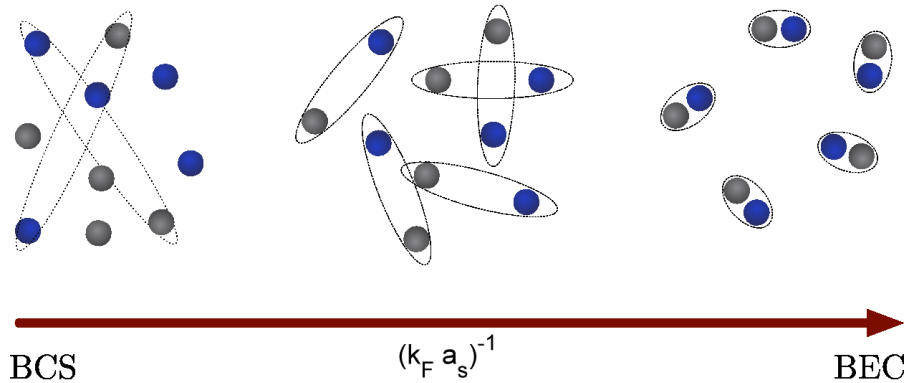
Om een kwalitatief begrip te krijgen van de betekenis van de verstrooiingslengte in Fermi gassen is het voldoende om de eendeeltjesverstrooiing aan een sferische potentiaalput met diepte V_0 en een grootte r_0 (de typische afstand van de interatomaire potentiaal) te beschouwen. Dit model is een goede voorstelling van de meeste interacties tussen de atomen omdat enkel ijle gassen beschouwd worden, waardoor de typische interatomaire afstand veel groter is dan r_0 . De atomen voelen hierbij de details van de interatomaire potentiaal niet en de interactie wordt goed voorgesteld door de potentiaalput.

De verstrooiing van een enkel deeltje aan een potentiaalput wordt in detail beschreven in [15]. Een kleine negatieve verstrooiingslengte $a_s = 0^-$ correspondeert hier met een ondiepe potentiaalput die een zwakke aantrekkende interactie voorstelt. Naarmate de potentiaalput dieper wordt, begint a_s negatiever te worden tot op een bepaalde diepte van de put $a_s \rightarrow -\infty$ divergeert. Deze divergentie komt overeen met het ontstaan van een gebonden toestand in de potentiaalput waarbij de verstrooiingslengte op de divergentie van teken wisselt naar $a_s \rightarrow +\infty$. Wanneer de potentiaalput nog dieper gemaakt wordt, komt deze gebonden toestand ook dieper te liggen en gaat de verstrooiingslengte langs de positieve



Figuur 1: De verstrooiingslengte langs een Feshbach resonantie voor ^{40}K atomen. Afbeelding afkomstig uit [14].

kant naar nul $a_s \rightarrow 0^+$. Het blijkt dus dat $a_s = \pm\infty$ dezelfde toestanden zijn en $a_s = 0^\pm$ twee verschillende limieten zijn. Het is hierdoor geschikter om de interactie voor te stellen als functie van de inverse verstrooiingslengte $(k_F a_s)^{-1}$ waarbij de Fermi golfvector k_F toegevoegd werd om de parameter dimensieloos te maken.



Figuur 2: De BCS-BEC crossover. Afbeelding afkomstig uit [16]

De koppelingsconstante $(k_F a_s)^{-1}$ deelt de interacties op in drie interactieregimes². Wanneer $(k_F a_s)^{-1} < -1$ zijn de interacties aantrekkend maar zwak. Dit correspondeert met de zogenaamde BCS limiet waarin het Fermi gas gedelocaliseerde Cooperparen van tegengestelde spin vormt. De fermionische condensatie in conventionele supergeleiders gebeurt in dit regime maar is hier ook tot beperkt. De andere limiet is de BEC limiet $(k_F a_s)^{-1} > 1$ waar gebonden toestanden mogelijk zijn. Atomen met tegengestelde spin vormen hier gelokaliseerde bosonische moleculen en het Fermi gas gedraagt zich als een BEC.

²Dit is slechts een kwalitatief onderscheid, in de werkelijkheid vindt er een continue overgang tussen de interactieregimes plaats.

Naarmate de inverse verstrooiingslengte van de BCS limiet naar de BEC limiet gaat maakt het gas een continue transitie van zwak interagerende gedelokaliseerde paren naar sterk gebonden moleculen. Deze overgang staat bekend als de BCS-BEC crossover. In het hart van de crossover bevindt zich een interactieregime die niet in BCS supergeleiders noch in BEC gassen te vinden is - het unitariteitsregime. In dit interactieregime bevinden de fermionische paren zich in een overgang van de BCS kant naar de BEC kant. De paren vormen geen puntdeeltjes maar zijn ruimtelijk veel sterker gelokaliseerd dan de BCS-paren. Een visuele representatie is te vinden in figuur (2).

1.2.3 Experimentele realisatie

Niet lang na de experimentele realisatie van het eerste BEC werd in 1999 een Fermi gas van ^{40}K atomen door B. DeMarco en D. S. Jin [17] op ultrakoude temperaturen in het kwantumregime (1.2) gebracht. In het experiment werden de atomen opgesloten in een magnetische val en vervolgens met behulp van verdampingskoeling tot temperaturen onder 300 nK gebracht. Op basis van het gedrag van de impulsverdeling en de totale energie konden de auteurs vaststellen dat het gas zich in het zogenaamde ontaarde kwantumregime van een Fermi gas bevond. Enkele jaren later werd fermionische condensatie in 2003 in een atomair gas van ^{40}K atomen aan de BCS kant van de Feshbach resonantie door de experimentele groep van D. S. Jin waargenomen [18]. In de groep van W. Ketterle werd in datzelfde jaar fermionische condensatie in een ^6Li gas aan de BEC kant van de BCS-BEC crossover gerealiseerd met evenals de waarneming van stabiele bosonische $^6\text{Li}_2$ moleculen. Kort hierna volgden verdere waarnemingen van fermionische condensatie en superfluiditeit doorheen de BCS-BEC crossover [19–22].

1.3 Vortices

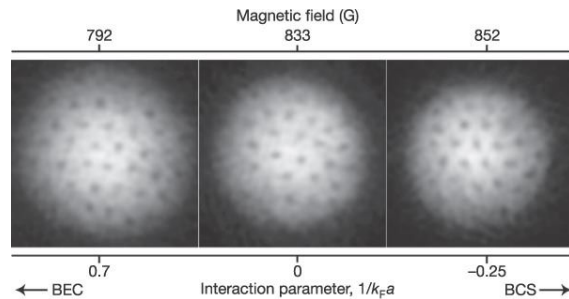
Het verschijnsel van vortices in ultrakoude systemen werd voor het eerst waargenomen in supergeleiders. In zwakke externe magnetische velden laten supergeleiders geen magnetische flux toe in het bulk van het materiaal. Het eerste type bestudeerde supergeleiders, de type-I supergeleiders, vertonen dit gedrag tot op een kritische waarde van het magnetisch veld waarna plots een transitie naar de niet-supergeleidende toestand plaatsvindt en de flux volledig doorgelaten wordt. In 1935 werden echter voor het eerst de type-II supergeleiders ontdekt [23]. Deze supergeleiders hebben typisch veel grotere kritische magnetische velden omdat ze lokaal de supergeleidende toestand kunnen verbreken om bundels van magnetische fluxlijnen door te laten zonder de globale supergeleidende toestand te verstoren. De theoretische beschrijving van dit proces in type-II supergeleiders liet nog op zich wachten tot in 1957 wanneer A. A. Abrikosov de Ginzburg-Landau theorie gebruikte om het vortexrooster te beschrijven [24]. Een vortex is een lokale verstoring van de supergeleidende fase naar de normale fase die een enkel fluxkwantum doorlaat. Om de doorgelaten flux te ondersteunen moeten er aanhoudende supergeleidende stromen rond de verstoring geïnduceerd worden. Wegens de afwezigheid van dissipatie kunnen deze vortices in theorie voor onbeperkte duur blijven bestaan. Vortices zijn van een fundamenteel experimenteel en theoretisch belang om een spectrum aan eigenschappen in supergeleiders te begrijpen en zijn nauw gerelateerd aan het slecht begrepen fenomeen van supergeleiding op hoge temperaturen.

Ook Bose-Einstein condensaten ondersteunen stabiele vortextoestanden die door middel van externe rotatie van het condensaat geïnduceerd kunnen worden. In feite ging de introductie van het Gross-Pitaevskii formalisme in 1961 in hetzelfde artikel gepaard met de toepassing hiervan op vortices [3]. Dit formalisme blijkt een goede beschrijving van de BEC vortices te geven en wordt vandaag de dag nog als voorkeursmiddel voor een theoretische studie gebruikt [25]. Ook hier zijn de vortices gekwantiseerd in de circulatie van het snelheidsveld. Dit volgt onmiddellijk uit de beschrijving van BEC's met een

kwantummechanische ordeparameter. Experimenteel werden vortices in BEC's voor het eerst in 1999 waargenomen [26]. Hier werd het condensaat met behulp van een laser geroteerd en werd een vortex van de grootte orde van micrometers waargenomen. In BEC's zijn vortices vooral interessant in de context van kwantumturbulentie [27].

Dit brengt de bespreking bij vortices in de BCS-BEC crossover in Fermi gassen waarbij de vortices bestudeerd kunnen worden in het unitariteitsregime dat in andere systemen niet toegankelijk is. De eerste waarneming van vortices in superfluïde fermionische gassen gebeurde in 2005 [28] waarbij in een gas van ${}^6\text{Li}$ atomen een vortexrooster in de verschillende interactieregimes van de BCS-BEC crossover gerealiseerd werd. In het experiment werd het Fermi gas in een optische dipoolval geplaatst waarna het gas op ultrakoude temperaturen gebracht werd door middel van verdampingskoeling en aan de BEC kant van de crossover in een superfluïde toestand condenseerde. Het condensaat werd dan met behulp van een laser geroteerd op een frequentie van 45Hz wat in het ontstaan van een vortexrooster resulteerde. Dit is te zien in figuur (3). Rond dezelfde tijd begon de interesse te groeien voor een theoretische beschrijving van vortices doorheen de BCS-BEC crossover. Vergeleken met supergeleiders en BEC's wordt voor de beschrijving van de superfluïde toestand in Fermi gassen een breder spectrum aan methodes gebruikt. Een eerste vaak gebruikte methode is gebaseerd op de Bogoliubov-de-Gennes aanpak [29] waarbij twee gekoppelde differentiaalvergelijkingen zelfconsistent opgelost moeten worden. De BdG aanpak is echter computationeel erg veeleisend op hogere temperaturen. In deze context is het dus interessant om met effectieve veldentheorieën (EFT's) te werken die het condensaat door middel van een macroscopische golffunctie beschrijven. Zo zijn extensies van de Ginzburg-Landau beschrijving voor een Fermi gas langs de BCS-BEC crossover succesvol gebruikt geweest [30]. Ook modificaties van de Gross-Pitaveskii aanpak zijn toepasbaar in de crossover [31]. De Ginzburg-Landau beschrijvingen zonder bijkomende extensies zijn echter inherent beperkt tot temperaturen in de buurt van de kritische temepatuur en geven bijgevolg slechts accurate beschrijvingen voor een kleine waarde van de ordeparameter.

Recent werd een effectieve veldentheorie afgeleid onder de aanname van een traag veranderlijke ordeparameter in ruimte en tijd maar zonder opgelegde beperkingen op de grootte van de ordeparameter [32], [33]. Deze beschrijving zou bijgevolg accuraat moeten zijn voor fermionische superfluïda langs de crossover tot op ultrakoude temperaturen. De EFT is succesvol gebruikt geweest voor de beschrijving van systemen met multiband condensatie [32], solitonen [34], [35] en vortices [36].



Figuur 3: Een vortexrooster waargenomen doorheen de BCS-BEC crossover in een ${}^6\text{Li}$ Fermi gas dat geroteerd werd met behulp van een 532nm laser. Afbeelding afkomstig uit [28]

1.4 Onderzoeksvragen

Fermi gassen zijn bijzonder interessant ten opzichte van supergeleiders en BEC's omwille van de mogelijkheid om een groter aantal experimentele parameters aan te passen en hun gevolg op de superfluïde eigenschappen van het condensaat te bestuderen. Zoals besproken is het hierbij mogelijk om de interactieparameter te veranderen, spin-onbalans toe te voegen en multicomponent condensaten te bestuderen. Deze experimentele vrijheid wordt ook doorgetrokken naar de studie van vortices in deze systemen vanwege de manier waarop vortices geïnduceerd worden. Om een vortex te creëren wordt het condensaat in experimenten geroerd met een laser die niet ver afgestemd is van de resonantiefrequentie van de atomen [28], [37]. Het laserlicht induceert een Stark verschuiving van de grondtoestand ten gevolge van de level repulsie met de geëxciteerde toestand, waardoor de laser zowel aantrekkend als afstotend kan werken afhankelijk van de laserfrequentie. Omdat in een Fermi gas de verschillende componenten zich in verschillende hyperfijn toestanden bevinden, is het mogelijk om het laserlicht verschillend te laten interageren met de verschillende componenten. In de context van solitonen in een Fermi gas werd een manier om dit met gepolariseerd laserlicht te bereiken reeds voorgesteld [38]. Het zou bijgevolg mogelijk moeten zijn om in een Fermi gas bestaande uit twee componenten de verschillende componenten op verschillende frequenties en zelfs onder verschillende rotatie-assen te laten roteren. Dit opent een nieuwe experimentele vrijheidsgraad in de studie van vortices die eerder niet beschikbaar was in supergeleiders en BEC's.

Wat er gebeurt wanneer de verschillende componenten van een Fermi gas op verschillende frequenties geroteerd worden, is voor zover geweten nog niet onderzocht geweest. Het doel van deze masterthesis is om een eerste stap te zetten naar het toevoegen van deze vrijheidsgraad in de beschrijving van een Fermi gas bestaande uit twee componenten. Een opdeling in enkele concrete onderzoeksvragen wordt hieronder gemaakt:

- Hoe kan deze componentsgewijze rotatie theoretisch beschreven worden?
- Zal condensatie in een superfluïde toestand nog mogelijk zijn?
- Zijn vortices nog steeds energetisch voordelige toestanden?
- Is er een verschil in de vortexstructuur tussen een normale vortex bij gezamenlijke rotatie van beide componenten en een vortex waarbij enkel één component geroteerd wordt?

Om deze vragen te beantwoorden zal de reeds besproken effectieve veldentheorie [32] gebruikt worden zoals deze gebruikt werd in de context van vortices bij gezamenlijke rotatie van beide componenten [36]. De rotatiefrequenties verschillend nemen zal leiden tot andere lokale thermodynamische variabelen en nieuwe termen in de EFT. Deze resultaten zullen vervolgens gebruikt worden om de gestelde onderzoeksvragen te beantwoorden. Terwijl in de theoretische afleiding de rotatiefrequenties van de twee componenten algemeen genomen zullen worden, blijven in dit werk de toepassingen van componentsgewijze rotatie beperkt tot de rotatie van één component.

2 Ultrakoude Fermi gassen in een zadelpuntsbenadering

In dit hoofdstuk wordt de effectieve veldentheorie [32] voor componentsgewijze rotatie in laagste orde beschouwd. Eerst wordt de gebruikte wiskundige methode van Grassmann padintegratie kort ingeleid. Vervolgens wordt dit toegepast op een Fermi gas zowel in de zadelpuntsbenadering waarbij alle gradiënten van het macroscopisch veld niet meegenomen worden als in de local density benadering. Dit zal tot de vrije energie van het Fermi gas leiden waarmee algemene grootheden zoals de uniforme bindingsenergie van de fermionische paren, de kritische temperatuur, en het effect van de spin-onbalans als functie van de interactieparameter bestudeerd kunnen worden.

2.1 Grassmann padintegralen voor fermionische veel-deeltjes systemen

Net zoals in de klassieke veldentheorie kunnen in de kwantumveldentheorie veel-deeltjes systemen in twee verschillende formalismen beschreven worden. De eerste optie is om een klassieke Hamiltoniaandichtheid $\mathcal{H}(\pi(\mathbf{s}), \varphi(\mathbf{s}), \mathbf{s})$ te beschouwen en de klassieke velden $\pi(\mathbf{s})$ en $\varphi(\mathbf{s})$ dan te kwantiseren door ze naar operatoren te promoveren. Het kwantummechanisch karakter zit dan verborgen in de commutatierelaties tussen de operatoren en de manier waarop verwachtingswaarden berekend worden. De andere optie die hier gebruikt zal worden is om de klassieke Lagrangiaandichtheid $\mathcal{L}(\varphi(\mathbf{s}), \nabla_{\mathbf{s}}\varphi(\mathbf{s}), \mathbf{s})$ te beschouwen en de kwantummechanische effecten dan mee te nemen door in de actie $S = \int \mathcal{L} \mathbf{d}\mathbf{s}$ over alle mogelijke realisaties van het veld te sommeren. Deze sommatie over alle mogelijke realisaties van het complexe veld wordt wiskundig beschreven door een padintegraal:

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\bar{\varphi} \int \mathcal{D}\varphi e^{iS[\varphi]/\hbar}. \quad (2.1)$$

Hierbij is \mathcal{Z} de kwantummechanische amplitude voor vacuum naar vacuum transitie van het veld. Voor spinloze bosonen is het voldoende om scalaire complexe velden te beschouwen. Verder kan de thermodynamische partitiesom van dit veel-deeltjes systeem gevonden worden door in de actie de zogenaamde Wick-rotatie uit te voeren. Hierbij wordt het tijdsinterval waarin de transitie plaatsvindt $T \rightarrow -i\hbar\beta$ door de complexe Boltzmann factor vervangen. Indien ook de substitutie in $t \rightarrow -i\tau$ uitgevoerd wordt, is de actie te herformuleren als een Euclidische actie:

$$S_E = \int_0^{\hbar\beta} \int \mathcal{L} \mathbf{d}\mathbf{x} d\tau, \quad (2.2)$$

waarbij de thermodynamische partitiesom gegeven wordt door:

$$\mathcal{Z}_{th} = \int \mathcal{D}\bar{\varphi} \int \mathcal{D}\varphi e^{-S_E[\varphi]/\hbar}. \quad (2.3)$$

Om fermionen te beschrijven moet er in de padintegralen een extra commutatierelatie opgelegd worden vanwege het exclusieprincipe van Pauli. Hierbij worden de scalaire velden gepromoveerd naar zogenaamde Grassmann variabelen $(\bar{\varphi}_{\mathbf{x},\tau}, \varphi_{\mathbf{x},\tau}) \rightarrow (\bar{\psi}_{\mathbf{x},\tau}, \psi_{\mathbf{x},\tau})$ die steeds anticommuterend zijn:

$$\{\psi_{\mathbf{x},\tau}, \psi_{\mathbf{x}',\tau'}\} = 0 \quad \{\bar{\psi}_{\mathbf{x},\tau}, \bar{\psi}_{\mathbf{x}',\tau'}\} = 0 \quad \{\bar{\psi}_{\mathbf{x},\tau}, \psi_{\mathbf{x}',\tau'}\} = 0, \quad (2.4)$$

en waarvan de kwadraten aan een extra eigenschap moeten voldoen:

$$(\psi_{\mathbf{x},\tau})^2 = 0, \quad (\bar{\psi}_{\mathbf{x},\tau})^2 = 0. \quad (2.5)$$

Een lineaire combinatie van een Grassmann getal over het complexe veld blijft een Grassmann getal. Bovendien veranderen de eigenschappen van integratie naar:

$$\int d\psi = 1, \quad \int \psi d\psi = 0. \quad (2.6)$$

Functies van Grassmann variabelen zijn gedefiniëerd door hun Taylor expansies voor de complexe getallen. Verder blijven alle andere beschouwingen in de context van padintegratie onveranderd waardoor de thermodynamische partitiesom van een veel-deeltjes systeem van fermionen gegeven wordt door dezelfde uitdrukking (2.3):

$$\mathcal{Z}_{th} = \int \mathcal{D}\bar{\psi} \int \mathcal{D}\psi e^{-S_E[\psi]/\hbar}, \quad (2.7)$$

waarbij alle velden ψ Grassmann variabelen zijn.

2.2 De rotatie incorporeren in de fermionische actie

Voor een Fermi gas is de Euclidische actie in de exponent uit (2.7) gelijk aan:

$$S = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d\mathbf{r} \sum_{\sigma} \bar{\psi}_{\mathbf{r},\tau,\sigma} \left(\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}}^2 + U_{\sigma}(\mathbf{r}) - \mu_{\sigma} \right) \psi_{\mathbf{r},\tau,\sigma} + g \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d\mathbf{r} \bar{\psi}_{\mathbf{r},\tau,\uparrow} \bar{\psi}_{\mathbf{r},\tau,\downarrow} \psi_{\mathbf{r},\tau,\downarrow} \psi_{\mathbf{r},\tau,\uparrow}, \quad (2.8)$$

met g de interactiesterkte tussen de twee componenten en μ_{σ} en $U_{\sigma}(\mathbf{r})$ respectievelijk de chemische potentiaal en de opsluitingspotentiaal voor elke component $\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$. In de afleiding wordt er gewerkt met een cilindervormige harmonische opsluitingspotentiaal $U_{\sigma} = \frac{1}{2}m(\omega_r^2 r^2 + \omega_z^2 z^2)$ waarbij r en z de respectievelijke cilindrische coördinaten zijn. In de latere hoofdstukken van dit werk wordt een harde-wand container beschouwd waarbij $\omega_r = \omega_z = 0$ gesteld zullen worden. Een rotatie van de individuele componenten van het Fermi gas langs de cilinderas met frequenties $\boldsymbol{\omega}_{\sigma}$ kan worden inbegrepen door de volgende substituties te maken [39]:

$$\mathbf{p}_{\sigma} \rightarrow \mathbf{p}_{\sigma} - \mathbf{A}_{\sigma}, \quad (2.9)$$

$$U_{\sigma}(\mathbf{r}) \rightarrow V_{\sigma}(\mathbf{r}) = U_{\sigma}(\mathbf{r}) - \frac{1}{2}m\omega_{\sigma}^2 r^2 = \frac{1}{2}m(\omega_r^2 r^2 - \omega_{\sigma}^2 r^2 + \omega_z^2 z^2), \quad (2.10)$$

met als effectieve vectorpotentiaal:

$$\mathbf{A}_{\sigma}(\mathbf{r}) = m(\boldsymbol{\omega}_{\sigma} \times \mathbf{r}). \quad (2.11)$$

Vervolgens wordt er een substitutie gemaakt om over te gaan naar $\tau' = \tau \frac{E_F}{\hbar}$ en $\mathbf{x} = \mathbf{r}k_F$. Na het invoeren van rotatie wordt de actie in deze dimensieloze variabelen:

$$S = \frac{\hbar}{k_F^3} \int_0^{T_F/T} d\tau \int d\mathbf{x} \sum_{\sigma} \bar{\psi}_{\mathbf{x},\tau,\sigma} \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \left(\nabla_{\mathbf{x}} - \frac{i\mathbf{A}_{\sigma}(\mathbf{x})}{\hbar k_F^2} \right)^2 + \frac{V_{\sigma}(\mathbf{x})}{E_F k_F^2} - \frac{\mu_{\sigma}}{E_F} \right) \psi_{\mathbf{x},\tau,\sigma} + \frac{\hbar g}{k_F^3 E_F} \int_0^{T_F/T} d\tau \int d\mathbf{x} \bar{\psi}_{\mathbf{x},\tau,\uparrow} \bar{\psi}_{\mathbf{x},\tau,\downarrow} \psi_{\mathbf{x},\tau,\downarrow} \psi_{\mathbf{x},\tau,\uparrow}. \quad (2.12)$$

Hier werd gebruik gemaakt van de Fermi-energie E_F , Fermi-golfvector k_F en Fermi-temperatuur T_F gegeven door $E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$ en $E_F = k_B T_F$. De actie (2.12) kan verder vereenvoudigd worden met behulp van de Fermi-frequentie gegeven door $E_F = \hbar \omega_F$. Hiermee kunnen de termen \mathbf{A}_σ en V_σ herschreven worden:

$$\frac{\mathbf{A}_\sigma(\mathbf{x})}{\hbar k_F^2} = \frac{1}{\hbar k_F^2} \frac{\hbar^2 k_F^2}{2E_F} (\boldsymbol{\omega}_\sigma \times \mathbf{x}) = \frac{1}{2} \left(\frac{\boldsymbol{\omega}_\sigma}{\omega_F} \times \mathbf{x} \right) = \frac{1}{2} (\boldsymbol{\omega}'_\sigma \times \mathbf{x}) = \mathbf{A}'_\sigma(\mathbf{x}), \quad (2.13)$$

en analoog voor de effectieve opsluitingspotentialiaal V_σ :

$$\frac{V_\sigma(\mathbf{x})}{E_F k_F^2} = \frac{1}{E_F k_F^2} \frac{\hbar^2 k_F^2}{2E_F} \left[\frac{(\omega_r'^2 - \omega_\sigma'^2) r^2}{2} + \frac{\omega_z'^2 z^2}{2} \right] = \frac{(\omega_r'^2 - \omega_\sigma'^2) r^2}{4} + \frac{\omega_z'^2 z^2}{4} = V'_\sigma(\mathbf{x}). \quad (2.14)$$

Bijgevolg komt het erop neer dat in de actie $m \rightarrow \frac{1}{2}$ en dat de rotatie-en opsluitingsfrequenties in eenheden van ω_F gemeten worden. De chemische potentiaal $\mu'_\sigma = \frac{\mu_\sigma}{E_F}$ en de interactieparameter $g' = \frac{g k_F^3}{E_F}$ worden ook dimensieloos gemaakt. Na het weglaten van de accenten wordt de actie (nog steeds in SI eenheden) gegeven door:

$$\begin{aligned} S = & \frac{\hbar}{k_F^3} \int_0^{T_F/T} d\tau \int d\mathbf{x} \sum_\sigma \bar{\psi}_{\mathbf{x},\tau,\sigma} \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - (\nabla_{\mathbf{x}} - i\mathbf{A}_\sigma(\mathbf{x}))^2 + V_\sigma(\mathbf{x}) - \mu_\sigma \right) \psi_{\mathbf{x},\tau,\sigma} \\ & + \frac{\hbar g}{k_F^6} \int_0^{T_F/T} d\tau \int d\mathbf{x} \bar{\psi}_{\mathbf{x},\tau,\uparrow} \bar{\psi}_{\mathbf{x},\tau,\downarrow} \psi_{\mathbf{x},\tau,\downarrow} \psi_{\mathbf{x},\tau,\uparrow}. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Omwille van notationale eenvoud kan nog de hernoeming $\beta = \frac{T_F}{T}$ gemaakt worden. Om alles kort samen te vatten in de actie (2.15):

- De actie zelf is nog steeds dezelfde Euclidische actie als in (2.8). Substituties en hernoemingen hebben plaatsgevonden, de actie zelf is echter nog steeds in de juiste SI eenheden.
- De positie \mathbf{x} en tijd τ zijn dimensieloos, de Grassmann variabelen niet.
- $\mathbf{A}'_\sigma(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} (\boldsymbol{\omega}'_\sigma \times \mathbf{x})$ en $V'_\sigma(\mathbf{x}) = \frac{(\omega_r'^2 - \omega_\sigma'^2) r^2}{4} + \frac{\omega_z'^2 z^2}{4}$. De frequenties zijn dimensieloos $\omega_x = \omega_x^{old} / \omega_F$.
- De chemische potentiaal $\mu_\sigma = \frac{\mu_\sigma^{old}}{E_F}$ is dimensieloos.
- De interactieparameter $g = \frac{g^{old} k_F^3}{E_F}$ is dimensieloos.
- De inverse temperatuur $\beta = \frac{T_F}{T}$ is dimensieloos.

Uiteindelijk wordt er overgegaan naar gereduceerde eenheden met $k_F = 1$. In (2.15) verdwijnt k_F en valt \hbar weg in de definitie (2.7). De partitiesom wordt:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} = & \int \mathcal{D}\psi \exp \left[- \int_0^\beta d\tau \int d\mathbf{x} \sum_\sigma \bar{\psi}_{\mathbf{x},\tau,\sigma} \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - (\nabla_{\mathbf{x}} - i\mathbf{A}_\sigma(\mathbf{x}))^2 + V_\sigma(\mathbf{x}) - \mu_\sigma \right) \psi_{\mathbf{x},\tau,\sigma} \right. \\ & \left. - g \int_0^\beta d\tau \int d\mathbf{x} \bar{\psi}_{\mathbf{x},\tau,\uparrow} \bar{\psi}_{\mathbf{x},\tau,\downarrow} \psi_{\mathbf{x},\tau,\downarrow} \psi_{\mathbf{x},\tau,\uparrow} \right]. \end{aligned} \quad (2.16)$$

2.3 Hubbard-Stratonovich transformatie en Nambu spinoren

Het is geschikt om hier een plaatsafhankelijke chemische potentiaal te definiëren $\mu_\sigma(\mathbf{x}) = \mu_{\sigma,0} - V_\sigma(\mathbf{x})$. De index 0 in de chemische potentiaal wordt ingevoerd om te benadrukken dat dit de globale chemische potentiaal is uit (2.16). Deze definitie wordt gekozen om de analogie met andere werken [36] te behouden, maar er zijn verschillende definities van $\mu_\sigma(\mathbf{x})$ mogelijk die tot hetzelfde resultaat zouden leiden. Het is vervolgens mogelijk om in de vierde-orde term in (2.16) de Grassmann-velden te herschrijven met behulp van de introductie van een additionele padintegratie over een scalair veld Δ . Deze techniek is de Hubbard-Stratonovich transformatie [40], [41] waarmee de partitiesom (2.16) op de volgende manier herschreven wordt:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\psi \int \mathcal{D}\Delta \exp \left[- \int_0^\beta d\tau \int d\mathbf{x} \left(\sum_\sigma \bar{\psi}_{\mathbf{x},\tau,\sigma} \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - (\nabla_{\mathbf{x}} - i\mathbf{A}_\sigma(\mathbf{x}))^2 - \mu_\sigma(\mathbf{x}) \right) \psi_{\mathbf{x},\tau,\sigma} \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{\bar{\Delta}_{\mathbf{x},\tau} \Delta_{\mathbf{x},\tau}}{g} - \bar{\Delta}_{\mathbf{x},\tau} \psi_{\mathbf{x},\tau,\downarrow} \psi_{\mathbf{x},\tau,\uparrow} - \Delta_{\mathbf{x},\tau} \bar{\psi}_{\mathbf{x},\tau,\uparrow} \bar{\psi}_{\mathbf{x},\tau,\downarrow} \right) \right] = \int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\Delta e^{-S[\bar{\psi},\psi,\bar{\Delta},\Delta]}. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Door gebruik te maken van $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ kan de actie uitgeschreven worden³:

$$\begin{aligned} S = \int_0^\beta d\tau \int d\mathbf{x} \left[\sum_\sigma \bar{\psi}_{\mathbf{x},\tau,\sigma} \left(\partial_\tau - \nabla_{\mathbf{x}}^2 - \mu_\sigma(\mathbf{x}) + 2i\mathbf{A}_\sigma(\mathbf{x}) \cdot \nabla_{\mathbf{x}} + \mathbf{A}_\sigma^2 \right) \psi_{\mathbf{x},\tau,\sigma} \right. \\ \left. - \frac{\bar{\Delta}_{\mathbf{x},\tau} \Delta_{\mathbf{x},\tau}}{g} - \bar{\Delta}_{\mathbf{x},\tau} \psi_{\mathbf{x},\tau,\downarrow} \psi_{\mathbf{x},\tau,\uparrow} - \Delta_{\mathbf{x},\tau} \bar{\psi}_{\mathbf{x},\tau,\uparrow} \bar{\psi}_{\mathbf{x},\tau,\downarrow} \right]. \end{aligned} \quad (2.18)$$

De actie is kwadratisch in de fermionische velden en kan als volgt compact geschreven worden:

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\psi \int \mathcal{D}\Delta \exp[-S] = \int \mathcal{D}\psi \int \mathcal{D}\Delta \exp \left[\int_0^\beta d\tau \int d\mathbf{x} \left(\bar{\eta}_{\mathbf{x},\tau} \mathbb{G}_{\mathbf{x},\tau}^{-1} \eta_{\mathbf{x},\tau} + \frac{\bar{\Delta}_{\mathbf{x},\tau} \Delta_{\mathbf{x},\tau}}{g} \right) \right], \quad (2.19)$$

waarbij η de Nambu-spinoren zijn:

$$\bar{\eta}_{\mathbf{x},\tau} = (\bar{\psi}_{\mathbf{x},\tau,\uparrow}, \psi_{\mathbf{x},\tau,\downarrow}),$$

en

$$\eta_{\mathbf{x},\tau} = \begin{pmatrix} \psi_{\mathbf{x},\tau,\uparrow} \\ \bar{\psi}_{\mathbf{x},\tau,\downarrow} \end{pmatrix}.$$

De matrix $-\mathbb{G}_{\mathbf{x},\tau}^{-1}$ wordt in operatorvorm gegeven door:

$$-\mathbb{G}_{\mathbf{x},\tau}^{-1} = \begin{pmatrix} \partial_\tau - \nabla_{\mathbf{x}}^2 - \mu_\uparrow(\mathbf{x}) + 2i\mathbf{A}_\uparrow(\mathbf{x}) \cdot \nabla_{\mathbf{x}} + \mathbf{A}_\uparrow^2 & -\Delta_{\mathbf{x},\tau} \\ -\bar{\Delta}_{\mathbf{x},\tau} & \partial_\tau + \nabla_{\mathbf{x}}^2 + \mu_\downarrow(\mathbf{x}) + 2i\mathbf{A}_\downarrow(\mathbf{x}) \cdot \nabla_{\mathbf{x}} - \mathbf{A}_\downarrow^2 \end{pmatrix}. \quad (2.20)$$

Het is illustratief om dit aan te tonen. Hiervoor moet er gelden dat:

³Dit heeft niets met ijk-invariantie te maken maar geldt voor de specifieke vorm van \mathbf{A} .

$$\begin{aligned}\bar{\eta}_{\mathbf{x},\tau}(-\mathbb{G}_{\mathbf{x},\tau}^{-1})\eta_{\mathbf{x},\tau} &= \sum_{\sigma} \bar{\psi}_{\mathbf{x},\tau,\sigma} (\partial_{\tau} - \nabla_{\mathbf{x}}^2 - \mu_{\sigma}(\mathbf{x}) + 2i\mathbf{A}_{\sigma}(\mathbf{x}) \cdot \nabla_{\mathbf{x}} + \mathbf{A}_{\sigma}^2) \psi_{\mathbf{x},\tau,\sigma} \\ &\quad - \bar{\Delta}_{\mathbf{x},\tau} \psi_{\mathbf{x},\tau,\downarrow} \psi_{\mathbf{x},\tau,\uparrow} - \Delta_{\mathbf{x},\tau} \bar{\psi}_{\mathbf{x},\tau,\uparrow} \bar{\psi}_{\mathbf{x},\tau,\downarrow}.\end{aligned}\tag{2.21}$$

Door (2.20) op de Nambu-spinoren toe te passen:

$$\begin{aligned}\bar{\eta}_{\mathbf{x},\tau}(-\mathbb{G}_{\mathbf{x},\tau}^{-1})\eta_{\mathbf{x},\tau} &= \bar{\psi}_{\mathbf{x},\tau,\uparrow} (\partial_{\tau} - \nabla_{\mathbf{x}}^2 - \mu_{\uparrow}(\mathbf{x}) + 2i\mathbf{A}_{\uparrow}(\mathbf{x}) \cdot \nabla_{\mathbf{x}} + \mathbf{A}_{\uparrow}^2) \psi_{\mathbf{x},\tau,\uparrow} - \Delta_{\mathbf{x},\tau} \bar{\psi}_{\mathbf{x},\tau,\uparrow} \bar{\psi}_{\mathbf{x},\tau,\downarrow} - \bar{\Delta}_{\mathbf{x},\tau} \psi_{\mathbf{x},\tau,\downarrow} \psi_{\mathbf{x},\tau,\uparrow} \\ &\quad + \psi_{\mathbf{x},\tau,\downarrow} (\partial_{\tau} + \nabla_{\mathbf{x}}^2 + \mu_{\downarrow}(\mathbf{x}) + 2i\mathbf{A}_{\downarrow}(\mathbf{x}) \cdot \nabla_{\mathbf{x}} - \mathbf{A}_{\downarrow}^2) \bar{\psi}_{\mathbf{x},\tau,\downarrow}.\end{aligned}\tag{2.22}$$

De eerste drie termen hieruit zijn onmiddellijk gelijk aan de eerste drie termen in (2.21) en bijgevolg moet er enkel voor de vierde term aangetoond worden dat:

$$\begin{aligned}\psi_{\mathbf{x},\tau,\downarrow} (\partial_{\tau} + \nabla_{\mathbf{x}}^2 + \mu_{\downarrow}(\mathbf{x}) + 2i\mathbf{A}_{\downarrow}(\mathbf{x}) \cdot \nabla_{\mathbf{x}} - \mathbf{A}_{\downarrow}^2) \bar{\psi}_{\mathbf{x},\tau,\downarrow} \\ = \bar{\psi}_{\mathbf{x},\tau,\downarrow} (\partial_{\tau} - \nabla_{\mathbf{x}}^2 - \mu_{\downarrow}(\mathbf{x}) + 2i\mathbf{A}_{\downarrow}(\mathbf{x}) \cdot \nabla_{\mathbf{x}} + \mathbf{A}_{\downarrow}^2) \psi_{\mathbf{x},\tau,\downarrow}.\end{aligned}\tag{2.23}$$

Om dit aan te tonen moeten beide leden van (2.23) in Fourier-ruimte geschreven worden. Meer details over fouriertransformaties van Grassmann velden volgen in de volgende subsectie. Het linkerlid van (2.23) wordt:

$$\begin{aligned}\frac{1}{\beta V} \sum_{\mathbf{kn}} e^{-i\omega_n\tau + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \psi_{\mathbf{k},n,\downarrow} (\partial_{\tau} + \nabla_{\mathbf{x}}^2 + \mu_{\downarrow}(\mathbf{x}) + 2i\mathbf{A}_{\downarrow}(\mathbf{x}) \cdot \nabla_{\mathbf{x}} - \mathbf{A}_{\downarrow}^2) \sum_{\mathbf{k}'n'} e^{i\omega'_n\tau - i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}} \bar{\psi}_{\mathbf{k}',n',\downarrow} \\ = \frac{1}{\beta V} \sum_{\mathbf{kn}} \sum_{\mathbf{k}'n'} e^{-i\omega_n\tau + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \psi_{\mathbf{k},n,\downarrow} (i\omega_n - k^2 + \mu_{\downarrow}(\mathbf{x}) + 2\mathbf{A}_{\downarrow}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{k} - \mathbf{A}_{\downarrow}^2) e^{i\omega'_n\tau - i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}} \bar{\psi}_{\mathbf{k}',n',\downarrow},\end{aligned}\tag{2.24}$$

en het rechterlid:

$$\begin{aligned}\frac{1}{\beta V} \sum_{\mathbf{kn}} e^{i\omega_n\tau - i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \bar{\psi}_{\mathbf{k},n,\downarrow} (\partial_{\tau} - \nabla_{\mathbf{x}}^2 - \mu_{\downarrow}(\mathbf{x}) + 2i\mathbf{A}_{\downarrow}(\mathbf{x}) \cdot \nabla_{\mathbf{x}} + \mathbf{A}_{\downarrow}^2) \sum_{\mathbf{k}'n'} e^{-i\omega'_n\tau + i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}} \psi_{\mathbf{k}',n',\downarrow} \\ = \frac{1}{\beta V} \sum_{\mathbf{kn}} \sum_{\mathbf{k}'n'} e^{i\omega_n\tau - i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \bar{\psi}_{\mathbf{k},n,\downarrow} (-i\omega_n + k'^2 - \mu_{\downarrow}(\mathbf{x}) - 2\mathbf{A}_{\downarrow}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{k}' + \mathbf{A}_{\downarrow}^2) e^{-i\omega'_n\tau + i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}} \psi_{\mathbf{k}',n',\downarrow} \\ = \frac{1}{\beta V} \sum_{\mathbf{kn}} \sum_{\mathbf{k}'n'} e^{-i\omega_n\tau + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \psi_{\mathbf{k},n,\downarrow} (i\omega_n - k^2 + \mu_{\downarrow}(\mathbf{x}) + 2\mathbf{A}_{\downarrow}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{k} - \mathbf{A}_{\downarrow}^2) e^{i\omega'_n\tau - i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}} \bar{\psi}_{\mathbf{k}',n',\downarrow}.\end{aligned}\tag{2.25}$$

In de laatste stap gebeurt de hernoeming $\mathbf{k}', \mathbf{n}' = \mathbf{k}, \mathbf{n}$ en geeft de wissel van Grassmann variabelen een minteken. Het is hieruit duidelijk dat het linker-en rechterlid van (2.23) gelijk zijn en dit toont bijgevolg aan dat (2.19) een correcte schrijfwijze is van de partitiesom.

Verder kan er aangetoond worden dat [42]:

$$\int \mathcal{D}\psi \exp \left[\sum_{\mathbf{x},\tau} \bar{\eta}_{\mathbf{x},\tau} \mathbb{G}_{\mathbf{x},\tau} \eta_{\mathbf{x},\tau} \right] = \exp \left[\sum_{\mathbf{x},\tau} \log [-\det(-\mathbb{G}_{\mathbf{x},\tau})] \right],\tag{2.26}$$

waardoor partitiesom (2.19) te schrijven is als:

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\Delta \exp \left[- \int_0^\beta d\tau \int d\mathbf{x} \left(-\frac{\bar{\Delta}_{\mathbf{x},\tau} \Delta_{\mathbf{x},\tau}}{g} - \log [-\det(-\mathbb{G}_{\mathbf{x},\tau})] \right) \right] \quad (2.27)$$

Het logaritme in de actie (2.27) laat zich niet exact uitrekenen wegens de differentiaaloperatoren in de Greense functie. Een gradiëntexpansie voor traag veranderlijke velden kan in deze context gemaakt worden, wat tot een effectieve veldentheorie zal leiden. Hier wordt er verder in dit werk nog uitgebreid op teruggekomen. Eerst is het echter interessant om een eenvoudiger geval te beschouwen in de zadel-puntsbenadering. Hiervoor moet de actie eerst in reciproke ruimte geschreven worden wat in de volgende sectie gedaan wordt.

2.4 De actie in reciproke ruimte

De gebruikte Fourier-reeksen worden gegeven door:

$$\Delta_{\mathbf{x},\tau} = \frac{1}{\sqrt{\beta V}} \sum_{\mathbf{q},m} e^{-i\bar{\omega}_m\tau + i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \Delta_{\mathbf{q},m}, \quad \bar{\Delta}_{\mathbf{x},\tau} = \frac{1}{\sqrt{\beta V}} \sum_{\mathbf{q},m} e^{i\bar{\omega}_m\tau - i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \bar{\Delta}_{\mathbf{q},m}, \quad (2.28)$$

waarbij $\bar{\omega}_n = 2n\pi/\beta$ de bosonische Matsubara frequentie is. De inverse transformaties worden gegeven door:

$$\Delta_{\mathbf{q},m} = \frac{1}{\sqrt{\beta V}} \int_0^\beta d\tau \int d\mathbf{x} e^{i\bar{\omega}_m\tau - i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \Delta_{\mathbf{x},\tau}, \quad \bar{\Delta}_{\mathbf{q},m} = \frac{1}{\sqrt{\beta V}} \int_0^\beta d\tau \int d\mathbf{x} e^{-i\bar{\omega}_m\tau + i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \bar{\Delta}_{\mathbf{x},\tau}. \quad (2.29)$$

Voor de fermionische velden gelden analoge relaties met de fermionische Matsubara frequenties $\omega_n = (2n+1)\pi/\beta$. De volgende relatie zal verder ook gebruikt worden:

$$\int_0^\beta d\tau \int d\mathbf{x} e^{-i(\omega_{n'} - \omega_n)\tau + i(\mathbf{k}' - \mathbf{k})\cdot\mathbf{x}} = V\beta\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\delta_{n,n'}. \quad (2.30)$$

Na de Fourier representaties van de velden ψ en Δ in (2.18) te substitueren wordt de actie:

$$\begin{aligned} S = & \int_0^\beta d\tau \int d\mathbf{x} \left[\frac{1}{\beta V} \sum_{\mathbf{k}n} \sum_{\mathbf{k}'n'} e^{i\omega_n\tau - i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \bar{\psi}_{\mathbf{k},n,\downarrow} (-i\omega_n + k^2 - \mu_{\downarrow}(\mathbf{x}) - 2\mathbf{A}_{\downarrow}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{k} + \mathbf{A}_{\downarrow}^2) e^{-i\omega_{n'}\tau + i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}} \psi_{\mathbf{k}',n',\downarrow} \right. \\ & + \frac{1}{\beta V} \sum_{\mathbf{k}n} \sum_{\mathbf{k}'n',\sigma} e^{i\omega_n\tau - i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \bar{\psi}_{\mathbf{k},n,\uparrow} (-i\omega_n + k^2 - \mu_{\uparrow}(\mathbf{x}) - 2\mathbf{A}_{\uparrow}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{k} + \mathbf{A}_{\uparrow}^2) e^{-i\omega_{n'}\tau + i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}} \psi_{\mathbf{k}',n',\uparrow} \\ & - \frac{1}{\beta V g} \sum_{\mathbf{q},n} \sum_{\mathbf{q}',n'} \bar{\Delta}_{\mathbf{q},n} \Delta_{\mathbf{q}',n'} e^{i(\bar{\omega}_n - \bar{\omega}_{n'})\tau - i(\mathbf{q}' - \mathbf{q})\cdot\mathbf{x}} - \frac{1}{\beta V} \sum_{\mathbf{k},n} \sum_{\mathbf{k}',n'} \bar{\Delta}_{\mathbf{x},\tau} \psi_{\mathbf{k},n,\downarrow} \psi_{\mathbf{k}',n',\uparrow} e^{-i(\omega_n + \omega_{n'})\tau + i(\mathbf{k} + \mathbf{k}')\cdot\mathbf{x}} \\ & \left. - \frac{1}{\beta V} \sum_{\mathbf{k},n} \sum_{\mathbf{k}',n'} \Delta_{\mathbf{x},\tau} \bar{\psi}_{\mathbf{k},n,\uparrow} \bar{\psi}_{\mathbf{k}',n',\downarrow} e^{i(\omega_n + \omega_{n'})\tau - i(\mathbf{k} + \mathbf{k}')\cdot\mathbf{x}} \right]. \quad (2.31) \end{aligned}$$

De actie zal benaderd worden in de local density benadering (LDA - local density approximation). Hierbij wordt de berekening beperkt tot afzonderlijke volume-elementen δV van de orde van de paarcor-relatielengte ξ_p rond een vaste positie \mathbf{x} . De trage macroscopische veranderingen van $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ en $\mu(\mathbf{x})$ zijn

gemiddeld pas van belang op afstanden groter dan ξ_p en kunnen ze bijgevolg in (2.31) uit de integralen genomen worden. Dit zorgt ervoor dat met elk volume-element δV een positieafhankelijke actie $\delta S(\mathbf{x})$ en een partitiesom $\delta \mathcal{Z}(\mathbf{x})$ overeenkomt. Elke partitiesom geeft de dichtheid van vrije energie in dat volume-element rond \mathbf{x} , waarover dan geïntegreerd zal worden om de totale vrije energie te vinden. Met deze benaderingen vereenvoudigt de eerste term van (2.31) zich tot:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\beta V} \sum_{\mathbf{k}, n} \sum_{\mathbf{k}', n'} (-i\omega_n + k^2 - \mu_{\downarrow}(\mathbf{x}) - 2\mathbf{A}_{\downarrow}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{k} + \mathbf{A}_{\downarrow}^2) \bar{\psi}_{\mathbf{k}, n, \downarrow} \psi_{\mathbf{k}', n', \downarrow} \int_0^{\beta} d\tau \int d\mathbf{x} e^{i\omega_n \tau - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} e^{-i\omega_{n'} \tau + i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{x}} \\ &= \sum_{\mathbf{k}, n} (-i\omega_n + k^2 - \mu_{\downarrow}(\mathbf{x}) - 2\mathbf{A}_{\downarrow}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{k} + \mathbf{A}_{\downarrow}^2) \bar{\psi}_{\mathbf{k}, n, \downarrow} \psi_{\mathbf{k}, n, \downarrow}. \end{aligned} \quad (2.32)$$

Hetzelfde geldt natuurlijk voor de tweede spin term. In de derde term van (2.31) resulteren de integralen in twee Kronecker-delta's die een sommatie verwijderen. In de vierde en vijfde term van (2.31) staat de inverse Fourier transformatie van $\bar{\Delta}$ en Δ met $\omega_n + \omega_{n'}$ een bosonische Matsubara frequentie wegens $2n + 1 + 2n' + 1 = 2(n + n' + 1)$. Er geldt dus $\omega_n + \omega_{n'} = \bar{\omega}_{n+n'}$. Na deze stappen wordt de LDA actie:

$$\begin{aligned} S(\mathbf{x}) &= \sum_{\mathbf{k}, n} (-i\omega_n + k^2 - \mu_{\uparrow}(\mathbf{x}) - 2\mathbf{A}_{\uparrow}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{k} + \mathbf{A}_{\uparrow}^2) \bar{\psi}_{\mathbf{k}, n, \uparrow} \psi_{\mathbf{k}, n, \uparrow} \\ &+ \sum_{\mathbf{k}, n} (-i\omega_n + k^2 - \mu_{\downarrow}(\mathbf{x}) - 2\mathbf{A}_{\downarrow}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{k} + \mathbf{A}_{\downarrow}^2) \bar{\psi}_{\mathbf{k}, n, \downarrow} \psi_{\mathbf{k}, n, \downarrow} \\ &- \sum_{\mathbf{q}, n} \frac{\bar{\Delta}_{\mathbf{q}, n} \Delta_{\mathbf{q}, n}}{g} - \frac{1}{\sqrt{\beta V}} \sum_{\mathbf{k}, n} \sum_{\mathbf{k}', n'} \bar{\Delta}_{\mathbf{k}+\mathbf{k}', n+n'+1} \psi_{\mathbf{k}, n, \downarrow} \psi_{\mathbf{k}', n', \uparrow} - \frac{1}{\sqrt{\beta V}} \sum_{\mathbf{k}, n} \sum_{\mathbf{k}', n'} \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{k}', n+n'+1} \bar{\psi}_{\mathbf{k}, n, \uparrow} \bar{\psi}_{\mathbf{k}', n', \downarrow}. \end{aligned} \quad (2.33)$$

2.5 Zadelpuntsbenadering en de vrije energie

In de Fourier representatie van de actie (2.33) kan de voorheen vermelde zadelpuntsbenadering toegepast worden. De zadelpuntsbenadering neemt mogelijke fluctuaties in de bosonische velden niet mee en veronderstelt dat de bosonische velden in de $\mathbf{q} = 0$ en $m = 0$ modes gecondenseerd zijn:

$$\Delta_{\mathbf{q}, m} = \sqrt{\beta V} \delta(\mathbf{q}) \delta_{m,0} \Delta, \quad \bar{\Delta}_{\mathbf{q}, m} = \sqrt{\beta V} \delta(\mathbf{q}) \delta_{m,0} \Delta^*. \quad (2.34)$$

Dit betekent dat de sommatie in de laatste twee termen wegvalt en hierbij de voorwaarde $\mathbf{k} = -\mathbf{k}'$ opgelegd wordt:

$$\begin{aligned} S(\mathbf{x}) &= \sum_{\mathbf{k}, n} (-i\omega_n + k^2 - \mu_{\uparrow}(\mathbf{x}) - 2\mathbf{A}_{\uparrow}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{k} + \mathbf{A}_{\uparrow}^2) \bar{\psi}_{\mathbf{k}, n, \uparrow} \psi_{\mathbf{k}, n, \uparrow} \\ &+ \sum_{\mathbf{k}, n} (-i\omega_n + k^2 - \mu_{\downarrow}(\mathbf{x}) - 2\mathbf{A}_{\downarrow}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{k} + \mathbf{A}_{\downarrow}^2) \bar{\psi}_{\mathbf{k}, n, \downarrow} \psi_{\mathbf{k}, n, \downarrow} \\ &- \beta V \frac{|\Delta|^2}{g} - \bar{\Delta} \sum_{\mathbf{k}, n} \psi_{\mathbf{k}, n, \downarrow} \psi_{-\mathbf{k}, -n-1, \uparrow} - \Delta \sum_{\mathbf{k}, n} \bar{\psi}_{\mathbf{k}, n, \uparrow} \bar{\psi}_{-\mathbf{k}, -n-1, \downarrow}. \end{aligned} \quad (2.35)$$

Weer is het geschikt om hier de ψ 's samen te nemen in een Nambu spinor notatie. Dit kan gedaan worden na een nauwkeurige herindexatie van de termen in de actie. Hiervoor wordt in de tweede term de sommatie over $-\mathbf{k}$ in plaats van \mathbf{k} uitgevoerd, waarna \mathbf{k} naar $-\mathbf{k}$ hernoemd wordt. Dit resulteert in:

$$\begin{aligned}
S(\mathbf{x}) &= \sum_{\mathbf{k},n} \left(-i\omega_n + k^2 - \mu_{\uparrow}(\mathbf{x}) - 2\mathbf{A}_{\uparrow}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{k} + \mathbf{A}_{\uparrow}^2 \right) \bar{\psi}_{\mathbf{k},n,\uparrow} \psi_{\mathbf{k},n,\uparrow} \\
&+ \sum_{\mathbf{k},n} \left(-i\omega_n + k^2 - \mu_{\downarrow}(\mathbf{x}) + 2\mathbf{A}_{\downarrow}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{k} + \mathbf{A}_{\downarrow}^2 \right) \bar{\psi}_{-\mathbf{k},n,\downarrow} \psi_{-\mathbf{k},n,\downarrow} \\
&- \beta V \frac{|\Delta|^2}{g} - \bar{\Delta} \sum_{\mathbf{k},n} \psi_{\mathbf{k},n,\downarrow} \psi_{-\mathbf{k},-n-1,\uparrow} - \Delta \sum_{\mathbf{k},n} \bar{\psi}_{\mathbf{k},n,\uparrow} \bar{\psi}_{-\mathbf{k},-n-1,\downarrow}.
\end{aligned} \tag{2.36}$$

Vervolgens worden de indices van de Grassmann velden hernoemd $\psi_n \rightarrow \psi_{2n+1}$. De nieuwe ψ_3 is niet meer dezelfde Grassmann variabele als de oude ψ_3 . Hetzelfde wordt dan gedaan voor de ω 's. Concreet is ω_1 bijgevolg niet meer $(2(1) + 1)\pi/\beta$ maar $(2(0) + 1)\pi/\beta$. In deze nieuwe notatie verandert de vorm van de eerste twee termen niet maar loopt de sommatie nu enkel over oneven n -waarden. In de laatste twee termen daarentegen wordt in deze stap de notatie wel aangepast en blijft de sommatie over alle n lopen:

$$\begin{aligned}
S(\mathbf{x}) &= \sum_{\mathbf{k},n(o)} \left(-i\omega_n + k^2 - \mu_{\uparrow}(\mathbf{x}) - 2\mathbf{A}_{\uparrow}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{k} + \mathbf{A}_{\uparrow}^2 \right) \bar{\psi}_{\mathbf{k},n,\uparrow} \psi_{\mathbf{k},n,\uparrow} \\
&+ \sum_{\mathbf{k},n(o)} \left(-i\omega_n + k^2 - \mu_{\downarrow}(\mathbf{x}) + 2\mathbf{A}_{\downarrow}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{k} + \mathbf{A}_{\downarrow}^2 \right) \bar{\psi}_{-\mathbf{k},n,\downarrow} \psi_{-\mathbf{k},n,\downarrow} \\
&- \beta V \frac{|\Delta|^2}{g} - \bar{\Delta} \sum_{\mathbf{k},n} \psi_{\mathbf{k},2n+1,\downarrow} \psi_{-\mathbf{k},-2n-1,\uparrow} - \Delta \sum_{\mathbf{k},n} \bar{\psi}_{\mathbf{k},2n+1,\uparrow} \bar{\psi}_{-\mathbf{k},-2n-1,\downarrow}.
\end{aligned} \tag{2.37}$$

Door nu in de laatste twee termen de som over enkel oneven n op te leggen wordt de actie:

$$\begin{aligned}
S(\mathbf{x}) &= \sum_{\mathbf{k},n(o)} \left(-i\omega_n + k^2 - \mu_{\uparrow}(\mathbf{x}) - 2\mathbf{A}_{\uparrow}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{k} + \mathbf{A}_{\uparrow}^2 \right) \bar{\psi}_{\mathbf{k},n,\uparrow} \psi_{\mathbf{k},n,\uparrow} \\
&+ \sum_{\mathbf{k},n(o)} \left(-i\omega_n + k^2 - \mu_{\downarrow}(\mathbf{x}) + 2\mathbf{A}_{\downarrow}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{k} + \mathbf{A}_{\downarrow}^2 \right) \bar{\psi}_{-\mathbf{k},n,\downarrow} \psi_{-\mathbf{k},n,\downarrow} \\
&- \beta V \frac{|\Delta|^2}{g} - \bar{\Delta} \sum_{\mathbf{k},n(o)} \psi_{\mathbf{k},n,\downarrow} \psi_{-\mathbf{k},-n,\uparrow} - \Delta \sum_{\mathbf{k},n(o)} \bar{\psi}_{\mathbf{k},n,\uparrow} \bar{\psi}_{-\mathbf{k},-n,\downarrow}.
\end{aligned} \tag{2.38}$$

Waarom was deze herindexatie nodig? Omdat pas in de vorm (2.38) van de actie het volgende mogelijk is. In de tweede term kan de sommatie uitgevoerd worden over $-n$ in plaats van over n en dan opnieuw naar $n = -n$ hernoemd worden. Omwille van de nieuwe notatie is $\omega_{-n} = -\omega_n$ en wordt na deze stap de actie:

$$\begin{aligned}
S(\mathbf{x}) &= \sum_{\mathbf{k}, n(o)} \left(-i\omega_n + k^2 - \mu_{\uparrow}(\mathbf{x}) - 2\mathbf{A}_{\uparrow}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{k} + \mathbf{A}_{\uparrow}^2 \right) \bar{\psi}_{\mathbf{k}, n, \uparrow} \psi_{\mathbf{k}, n, \uparrow} \\
&+ \sum_{\mathbf{k}, n(o)} \left(-i\omega_n - k^2 + \mu_{\downarrow}(\mathbf{x}) - 2\mathbf{A}_{\downarrow}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{k} - \mathbf{A}_{\downarrow}^2 \right) \psi_{-\mathbf{k}, -n, \downarrow} \bar{\psi}_{-\mathbf{k}, -n, \downarrow} \\
&- \beta V \frac{|\Delta|^2}{g} - \bar{\Delta} \sum_{\mathbf{k}, n(o)} \psi_{\mathbf{k}, n, \downarrow} \psi_{-\mathbf{k}, -n, \uparrow} - \Delta \sum_{\mathbf{k}, n(o)} \bar{\psi}_{\mathbf{k}, n, \uparrow} \bar{\psi}_{-\mathbf{k}, -n, \downarrow}.
\end{aligned} \tag{2.39}$$

Het extra minteken in de tweede term komt vanwege de wissel van de Grassmann variabelen. In deze vorm kan het fermionische deel van de actie in een Nambu spinor notatie geschreven worden met:

$$\bar{\eta}_{\mathbf{k}, n} = (\bar{\psi}_{\mathbf{k}, n, \uparrow}, \psi_{-\mathbf{k}, -n, \downarrow}),$$

en

$$\eta_{\mathbf{k}, n} = \begin{pmatrix} \psi_{\mathbf{k}, n, \uparrow} \\ \bar{\psi}_{-\mathbf{k}, -n, \downarrow} \end{pmatrix}.$$

De matrix $-\mathbb{G}_{\mathbf{k}, n}^{-1}$ wordt dan gegeven door:

$$-\mathbb{G}_{\mathbf{k}, n}^{-1} = \begin{pmatrix} -i\omega_n + k^2 - \mu_{\uparrow}(\mathbf{x}) - 2\mathbf{A}_{\uparrow}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{k} + \mathbf{A}_{\uparrow}^2 & -\Delta \\ -\Delta^* & -i\omega_n - k^2 + \mu_{\downarrow}(\mathbf{x}) - 2\mathbf{A}_{\downarrow}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{k} - \mathbf{A}_{\downarrow}^2 \end{pmatrix}. \tag{2.40}$$

De partitiesom van een LDA volume element rond een positie \mathbf{x} kan hiermee geschreven worden als:

$$\mathcal{Z}(\mathbf{x}) = \int \mathcal{D}\psi \exp \left[\beta V \frac{|\Delta|^2}{g} + \sum_{\mathbf{k}, n} \bar{\eta}_{\mathbf{k}, n} \mathbb{G}_{\mathbf{k}, n}^{-1}(\mathbf{x}) \eta_{\mathbf{k}, n} \right] \sim \exp \left[\beta V \frac{|\Delta|^2}{g} + \sum_{\mathbf{k}, n} \log [-\det (-\mathbb{G}_{\mathbf{k}, n}^{-1}(\mathbf{x}))] \right]. \tag{2.41}$$

Merk op dat het niet steeds nodig is om expliciet te schrijven dat de som over oneven n loopt, de som loopt over alle fermionische Matsubara frequenties. Omdat het logaritme in de exponent geen differentiaaloperatoren meer bevat kan deze uitgerekend worden. Eerst wordt de determinant van $-\mathbb{G}_{\mathbf{k}, n}^{-1}(\mathbf{x})$ uitgerekend:

$$-\det(-\mathbb{G}_{\mathbf{k}, n}^{-1}(\mathbf{x})) = - \left(-i\omega_n + k^2 - \mu_{\uparrow}(\mathbf{x}) - 2\mathbf{A}_{\uparrow}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{k} + \mathbf{A}_{\uparrow}^2 \right) \left(-i\omega_n - k^2 + \mu_{\downarrow}(\mathbf{x}) - 2\mathbf{A}_{\downarrow}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{k} - \mathbf{A}_{\downarrow}^2 \right) + |\Delta|^2. \tag{2.42}$$

Het is geschikt om de volgende variabelen in te voeren:

$$\mu_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \frac{\mu_{\uparrow}(\mathbf{x}) + \mu_{\downarrow}(\mathbf{x})}{2} + (\mathbf{A}_{\uparrow} - \mathbf{A}_{\downarrow}) \cdot \mathbf{k} - \frac{\mathbf{A}_{\downarrow}^2 + \mathbf{A}_{\uparrow}^2}{2}, \tag{2.43}$$

$$\zeta_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \frac{\mu_{\uparrow}(\mathbf{x}) - \mu_{\downarrow}(\mathbf{x})}{2} + (\mathbf{A}_{\uparrow} + \mathbf{A}_{\downarrow}) \cdot \mathbf{k} - \frac{\mathbf{A}_{\uparrow}^2 - \mathbf{A}_{\downarrow}^2}{2}, \tag{2.44}$$

$$E_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \sqrt{(k^2 - \mu(\mathbf{x}))^2 + |\Delta|^2}, \tag{2.45}$$

$$\xi_{\mathbf{k}} = k^2 - \mu(\mathbf{x}). \tag{2.46}$$

Merk op dat de \mathbf{A}_σ^2 termen in $\mu_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ en $\zeta_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ wegvallen met de extra termen in de definities van $\mu_\sigma(\mathbf{x})$. De reden voor deze schrijfwijze is om de analogie met andere werken [36] en mogelijke beschouwingen van magnetische velden te behouden. De determinant (2.42) kan hiermee compact geschreven worden als:

$$-\det(-\mathbb{G}_{\mathbf{k},n}^{-1}) = (i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) - E_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}))(-i\omega_n - \zeta_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) - E_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})). \quad (2.47)$$

Nu moet het spoor van het logaritme van deze determinant berekend worden:

$$\sum_{\mathbf{k},n} \log [-\det(-\mathbb{G}_{\mathbf{k},n}^{-1})] = \sum_{\mathbf{k},n} \log [(i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) - E_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}))(-i\omega_n - \zeta_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) - E_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}))]. \quad (2.48)$$

De sommatie over n is een gekende Matsubara sommatie die met behulp van contourintegralen in het complexe vlak berekend kan worden. Het resultaat van deze berekening zou echter een divergentie in de vrije energie opleveren. Een renormalisatieprocedure wordt in detail in [43] beschreven waardoor de Matsubara sommatie resulteert in:

$$\sum_{\mathbf{k},n} \log [-\det(-\mathbb{G}_{\mathbf{k},n}^{-1})] = \sum_{\mathbf{k}} \{\log [2 \cosh(\beta E_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})) + 2 \cosh(\beta \zeta_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}))] - \beta \xi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})\}. \quad (2.49)$$

De partitiesom wordt:

$$Z(\mathbf{x}) \sim \exp \left[\beta V \frac{|\Delta|^2}{g} + \sum_{\mathbf{k}} \{\log [2 \cosh(\beta E_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})) + 2 \cosh(\beta \zeta_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}))] - \beta \xi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})\} \right]. \quad (2.50)$$

De partitiesom is ook gelijk aan:

$$\mathcal{Z} = \exp(-\beta F), \quad (2.51)$$

waarbij $F(T, V, \mu)$ de vrije energie (of beter de Legendre getransformeerde $F(T, V, N) - \mu N$) is. In de LDA benadering wordt op positie \mathbf{x} de vrije energiedichtheid bijgevolg gegeven door:

$$\frac{F(\mathbf{x})}{V} = \Omega(\mathbf{x}) = -\frac{|\Delta|^2}{g} - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{1}{\beta} \log [2 \cosh(\beta E_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})) + 2 \cosh(\beta \zeta_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}))] - \xi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \right]. \quad (2.52)$$

De renormalisatie van de contactinteractie in drie dimensies resulteert in gereduceerde eenheden in:

$$\frac{1}{g} = \frac{1}{8\pi k_F a_s} - \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{1}{2k^2}. \quad (2.53)$$

De reciproke som over \mathbf{k} wordt in (2.52) door een integraal vervangen:

$$\Omega(\mathbf{x}) = -\frac{|\Delta|^2}{8\pi k_F a_s} - \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \left[\frac{1}{\beta} \log [2 \cosh(\beta E_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})) + 2 \cosh(\beta \zeta_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}))] - \xi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) - \frac{|\Delta|^2}{2k^2} \right]. \quad (2.54)$$

Binnen de LDA redenering is het volume V in de voorgaande redenering een klein volume rond de positie \mathbf{x} waarin macroscopische veranderingen niet meegenomen worden. Om de totale vrije energie te vinden moet er over alle afzonderlijke volume elementen geïntegreerd worden. De totale vrije energie in de LDA benadering wordt hierdoor uiteindelijk gegeven door:

$$F = \int \Omega(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = -\frac{V |\Delta|^2}{8\pi k_F a_s} - \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{k} \left[\frac{1}{\beta} \log [2 \cosh(\beta E_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})) + 2 \cosh(\beta \zeta_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}))] - \xi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) - \frac{|\Delta|^2}{2k^2} \right], \quad (2.55)$$

waarbij V nu het totale volume van de container in dimensieloze eenheden is.

2.6 De bandkloofvergelijking en de vergelijking voor het deeltjesaantal

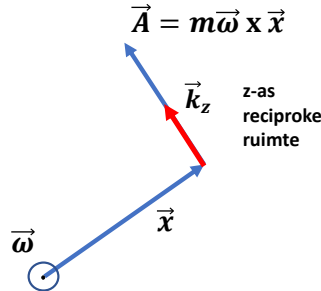
De vrije energie (2.55) bevat drie onbekende parameters. De eerste onbekende parameter $\zeta_0 = (\mu_{\uparrow,0} - \mu_{\downarrow,0})/2$ correspondeert met een extern opgelegde onbalans van de spins die zelfs zonder rotatie aanwezig zou zijn. Deze parameter kan dus als een onafhankelijke experimenteel instelbare grootheid beschouwd worden. De andere onbekende parameters Δ en $\mu_0 = (\mu_{\uparrow,0} + \mu_{\downarrow,0})/2$ worden gevonden door naar het minimum van de vrije energie zoeken onder de zelfconsistentie voorwaarde van een constant aantal deeltjes. De eerste eis voor het minimum van de vrije energie wordt gegeven door:

$$\frac{\partial F}{\partial \Delta} = 0, \quad (2.56)$$

wat leidt tot de zogenaamde bandkloofvergelijking:

$$-\frac{V 2\pi^2}{k_F a_s} = \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{k} \left[\frac{1}{E_{\mathbf{k}}} \frac{\sinh(\beta E_{\mathbf{k}})}{\cosh(\beta E_{\mathbf{k}}) + \cosh(\beta \zeta_{\mathbf{k}})} - \frac{1}{k^2} \right]. \quad (2.57)$$

De integralen zullen zich sterk vereenvoudigen na de overgang naar een concreet coördinatenstelsel. Het condensaat bevindt zich in een cilindrische container. De rotatie van de individuele spincomponenten gebeurt langs de z -as van de cilinder. De rotatiefrequenties worden bijgevolg gegeven door $\boldsymbol{\omega}_{\sigma} = \omega_{\sigma} \mathbf{e}_z$. In een oneindig lange cilinder kan de verticale opsluiting $\omega_z = 0$ buiten beschouwing gelaten worden. In deze coördinaten komt alle hoekafhankelijkheid voort uit de termen $\mathbf{A}_{\sigma} \cdot \mathbf{k}$ and \mathbf{A}_{σ}^2 .



Figuur 4: De z -as van het reciproke assenstelsel ligt langs de rotatierichting.

De kwadratische term wordt gegeven door $\mathbf{A}_{\sigma}^2 = 1/4\omega_{\sigma}^2(\mathbf{e}_z \times \mathbf{x})^2 = 1/4\omega_{\sigma}^2 r^2$, waar r de radiële cilindrische straal is. De evaluatie van de andere term vereist een keuze van het \mathbf{k} -assenstelsel. Daar de \mathbf{k} -integraal over een oneindig volume in de reciproke ruimte loopt zijn we vrij om voor elke vaste \mathbf{x} een keuze van de oriëntatie van het \mathbf{k} -assenstelsel te maken. De z -as van dit assenstelsel wordt steeds langs $\mathbf{e}_z \times \mathbf{x}$ gekozen. Dit wordt in figuur (4) geschetst. Hierdoor wordt $\mathbf{A}_{\sigma} \cdot \mathbf{k} = 1/2\omega_{\sigma}(\mathbf{e}_z \times \mathbf{x}) \cdot \mathbf{k} = 1/2\omega_{\sigma} r k \cos(\theta)$,

waarbij θ de hoek is met de z-as van het \mathbf{k} -stelsel. Andere termen in de integraal bevatten enkel de grootte van k of r . De integraties die overblijven lopen dus over r , k en θ . De andere variabelen α (de hoek in het xy-vlak van het \mathbf{x} -stelsel), z , en ϕ (de hoek in het xy-vlak van het \mathbf{k} -stelsel) kunnen uitgeïntegreerd worden:

$$-\frac{(\pi R^2 H) 2\pi^2}{k_F a_s} = H 4\pi^2 \int_0^R r dr \int_0^\infty dk \int_0^\pi d\theta \sin(\theta) \left[\frac{k^2}{E_{\mathbf{k}}} \frac{\sinh(\beta E_{\mathbf{k}})}{\cosh(\beta E_{\mathbf{k}}) + \cosh(\beta \zeta_{\mathbf{k}})} - 1 \right],$$

$$-\frac{(\pi R^2)}{2k_F a_s} = \int_0^R r dr \int_0^\infty dk \int_0^\pi d\theta \sin(\theta) \left[\frac{k^2}{E_{\mathbf{k}}} \frac{\sinh(\beta E_{\mathbf{k}})}{\cosh(\beta E_{\mathbf{k}}) + \cosh(\beta \zeta_{\mathbf{k}})} - 1 \right]. \quad (2.58)$$

Vergelijking (2.58) is de uiteindelijke bandkloofvergelijking die opgelost zal moeten worden. Deze vergelijking bevat echter nog de onbekende μ_0 die bepaald kan worden uit de zelfconsistentie voorwaarde voor het aantal deeltjes:

$$N = -\frac{\partial F}{\partial \mu}. \quad (2.59)$$

Dit resulteert in:

$$N = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{k} \left[1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \frac{\sinh(\beta E_{\mathbf{k}})}{\cosh(\beta E_{\mathbf{k}}) + \cosh(\beta \zeta_{\mathbf{k}})} \right]. \quad (2.60)$$

Door gebruik te maken van $k_F^3 = 3\pi^2 \frac{N}{V}$ met $k_F = 1$, wordt (2.60):

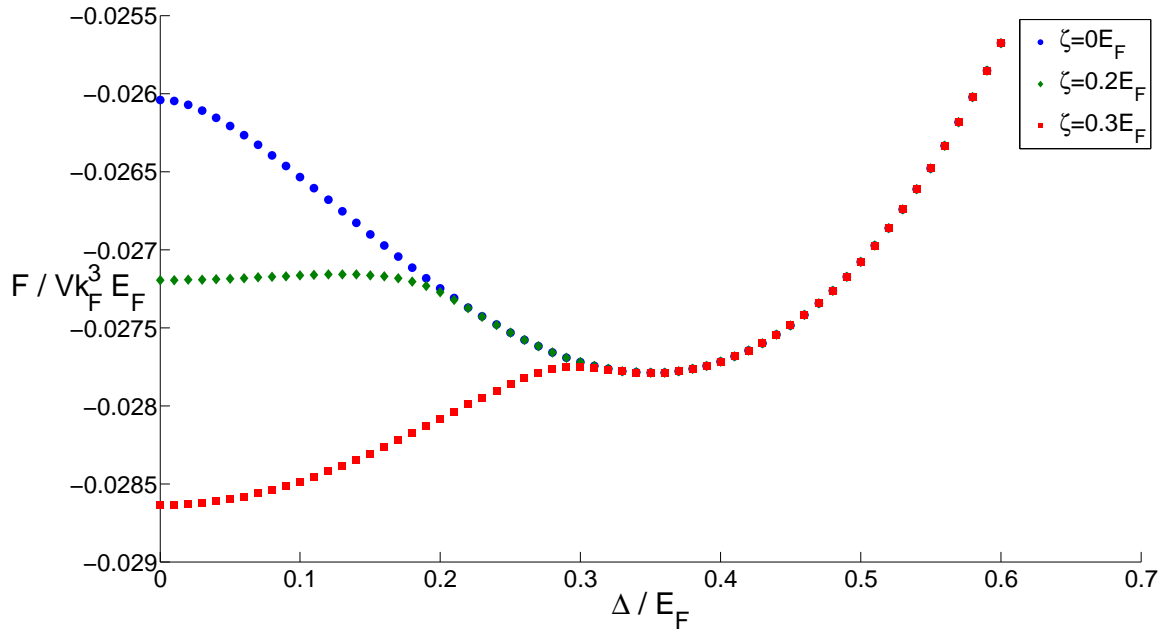
$$\frac{2R^2}{3} = \int dr r \int dk k^2 \int d\theta \sin(\theta) \left[1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \frac{\sinh(\beta E_{\mathbf{k}})}{\cosh(\beta E_{\mathbf{k}}) + \cosh(\beta \zeta_{\mathbf{k}})} \right]. \quad (2.61)$$

Vergelijking (2.61) is de uiteindelijke vergelijking voor het aantal deeltjes die opgelost moet worden. Deze vergelijking bevat natuurlijk ook de onbekende Δ . De bandkloofvergelijking (2.58) en de vergelijking voor het deeltjesaantal (2.61) moeten dus gelijktijdig opgelost worden om de paren (Δ, μ_0) te vinden. Hierbij moet er ook nagegaan worden of de energie absolute minima aan de rand kan bevatten die niet als het nulpunt van een afgeleide gevonden kunnen worden, waarover later meer.

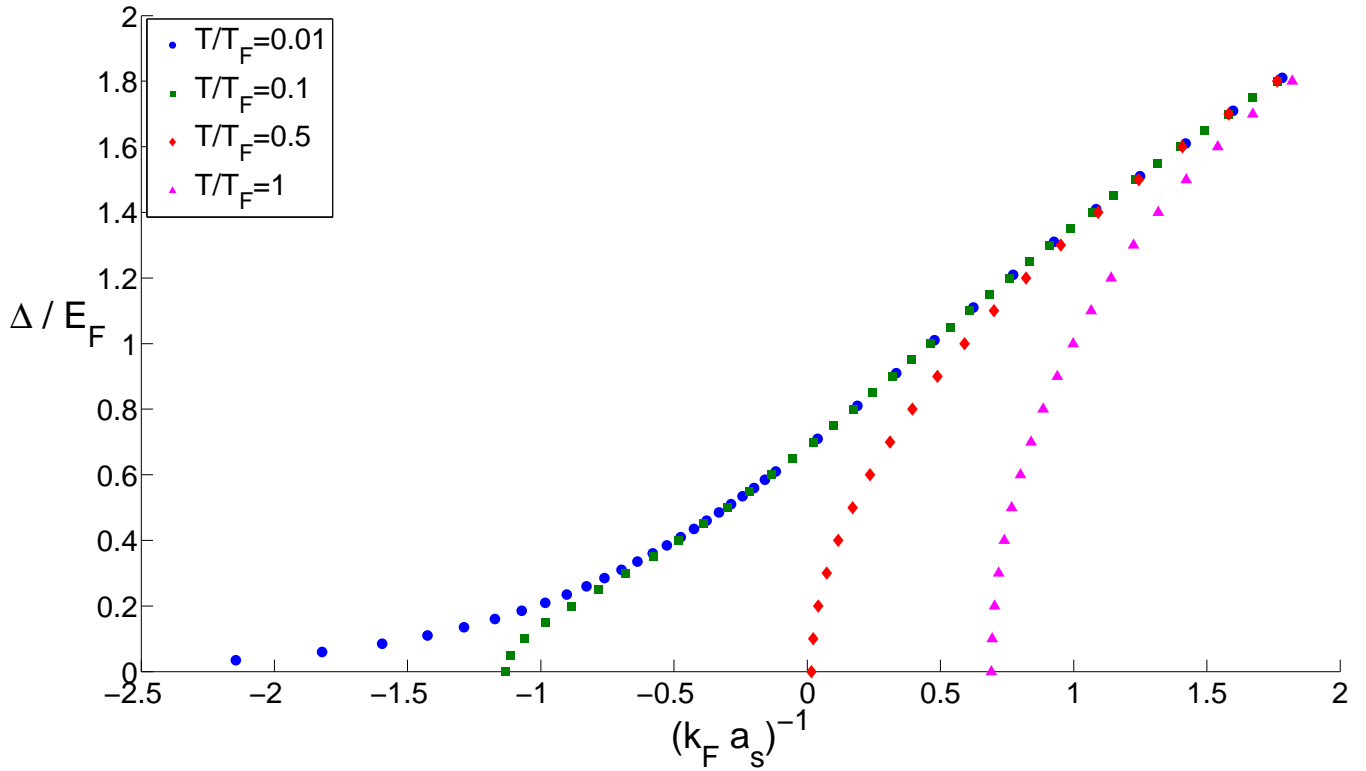
2.7 Resultaten zadelpuntsbenadering

2.7.1 Zonder rotatie

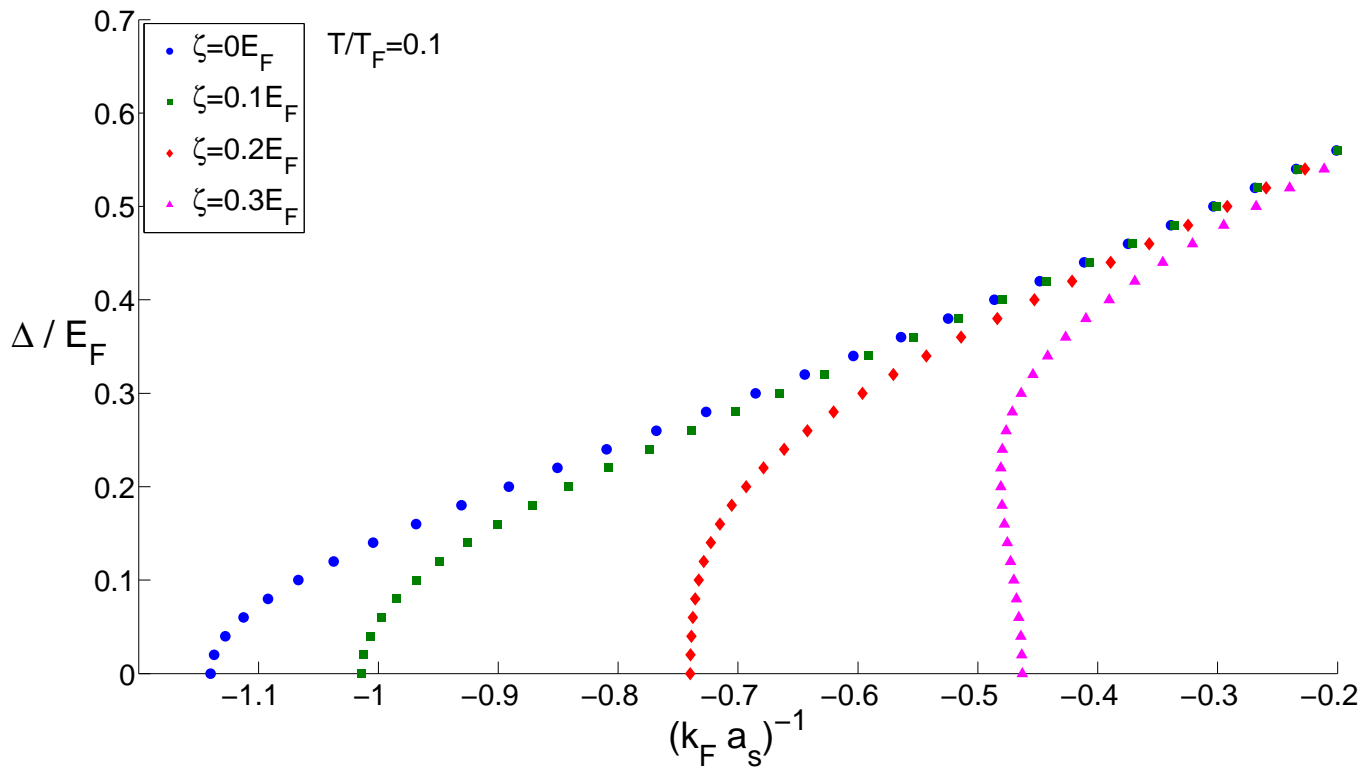
Eerst worden de algemene eigenschappen van het vrije Fermi gas bestudeerd waarbij $\omega = 0$. Figuur (6) illustreert het verloop van de bindingsenergie Δ als functie van de interactieparameter voor verschillende temperaturen. Hier is goed op te zien dat de BCS kant waar de interactieparameter negatief is, het gevoeligste voor opwarming is en daar de kleinste kritische temperatuur optreedt. Figuur (7) toont hetzelfde verloop voor een vaste temperatuur voor verschillende waarden van de spin-onbalans ζ . Het is opmerkelijk dat in figuur (7) het verloop van Δ voor $\zeta = 0.3E_F$ op een bepaald moment twee oplossingen voor Δ op een vaste $(k_F a_s)^{-1}$ geeft. Om na te gaan wat hier gebeurt wordt het verloop van Ω in figuren (8), (9), (10) en (11) onderzocht voor verschillende $(k_F a_s)^{-1}$ rond de waarde waar dit voor plaatsvindt.



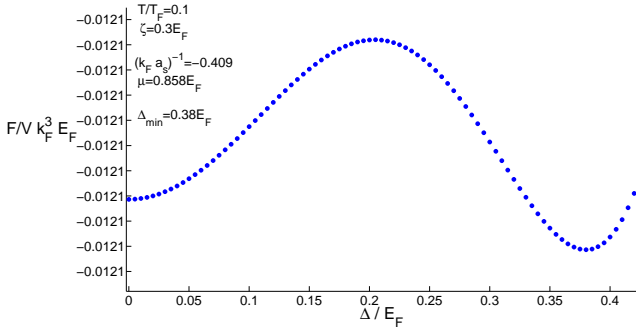
Figuur 5: De vrije energie per volume voor verschillende $\zeta = 0, 0.2, 0.3 E_F$ voor een gemiddelde $\mu_0 = 1.3 E_F$ en een $T/T_F = 0.01$ als functie van Δ . De vergelijking voor het behoud van deeltjes wordt hier niet opgelost en deze plot illustreert slechts het minimum van de vrije energie.



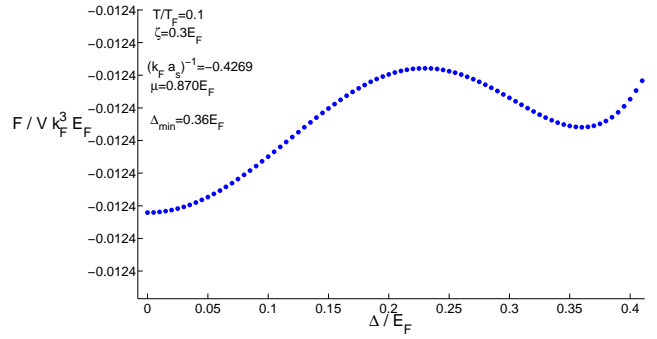
Figuur 6: De Δ gevonden na een simultane oplossing van de vergelijkingen voor de bandkloof en het deeltjesaantal voor verschillende waarden van $T/T_F = 0.01, 0.1, 0.5, 1$ als functie van $(k_F a_s)^{-1}$ bij $\zeta_0 = 0$.



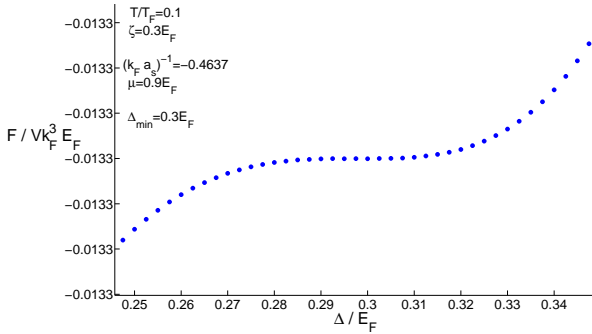
Figuur 7: De Δ gevonden na een simultane oplossing van de vergelijkingen voor de bandkloof en het deeltjesaantal voor verschillende waarden van $\zeta = 0, 0.1, 0.2, 0.3E_F$ als functie van $(k_F a_s)^{-1}$.



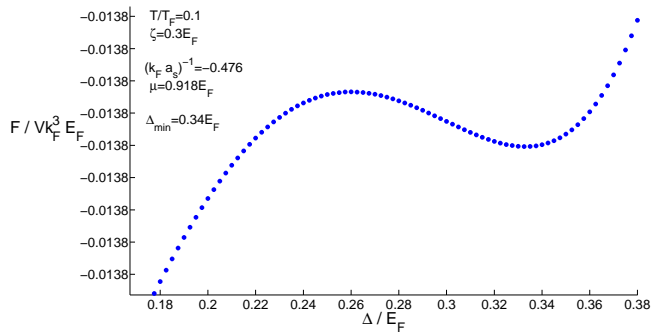
Figuur 8: $(k_F a_s)^{-1} = 0.409 \rightarrow \Delta_{min} = 0.38 E_F$



Figuur 9: $(k_F a_s)^{-1} = 0.427 \rightarrow \Delta_{min} = 0.36 E_F$

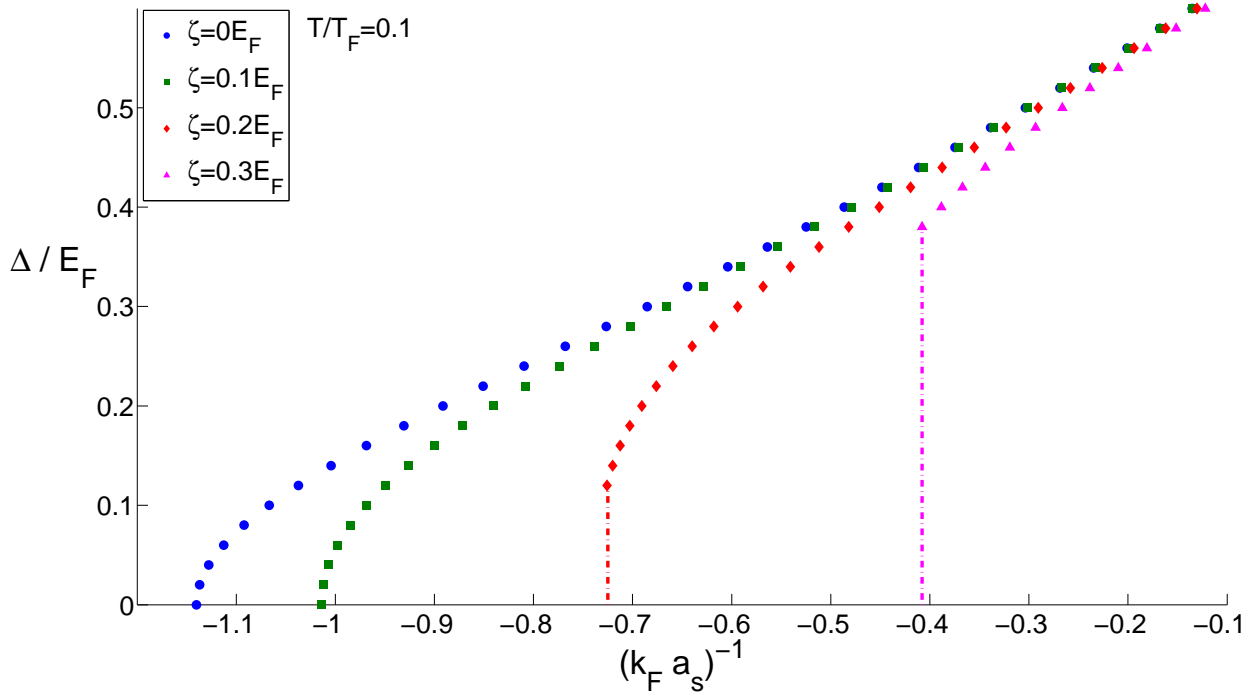


Figuur 10: $(k_F a_s)^{-1} = 0.464 \rightarrow \Delta_{min} = 0.3 E_F$



Figuur 11: $(k_F a_s)^{-1} = 0.476 \rightarrow \Delta_{min} = 0.34 E_F$

Figuren (8), (9), (10) en (11) illustreren het gedrag van de vrije energie per volume rond het punt waar twee oplossingen voor Δ op een vaste $(k_F a_s)^{-1}$ ontstaan in figuur (7). Hieruit wordt duidelijk dat eens $(k_F a_s)^{-1}$ een bepaalde kritische waarde bereikt het lokale minimum in Δ die door de bandkloofvergelijking gevonden wordt terug begint te groeien. Dit betekent dat onder een kritische waarde van Δ geen lokaal minimum meer bestaat en de bandkloofvergelijking enkel het globale maximum kan vinden. De tweede oplossing voor Δ voor een vaste $(k_F a_s)^{-1}$ is dus het globale maximum en correspondeert met een labiele toestand. Vooraleer dit gebeurt ontstaat er echter een globaal minimum op $\Delta = 0$. Zelfs de oplossingen voor het lokale minimum zijn in dit geval metastabiele oplossingen daar een niet superfluide toestand op $\Delta = 0$ met een lagere energie correspondeert. Dit is bovendien een illustratie die toont waarom het niet voldoende is om enkel de bandkloofvergelijking op te lossen maar het ook belangrijk is om de energie op globale minima te controleren. Dezelfde grafieken als in figuur (7) die het globale minimum weergeven zijn op figuur (12) te zien.



Figuur 12: De Δ gevonden na een simultane oplossing van de bandkloofvergelijking en de vergelijking voor het deeltjesaantal voor verschillende waarden van $\zeta = 0, 0.1, 0.2, 0.3E_F$ als functie van $(k_F a_s)^{-1}$. De cut-off op de laatste twee grafieken gebeurt op het moment dat $\Omega(\Delta = 0, \mu) < \Omega(\Delta, \mu)$.

2.7.2 Rotatie in rekening brengen

De resultaten uit de vorige subsectie geven een beeld op de eigenschappen van een vrij Fermi gas zonder rotatie of opsluitingspotentiaal. Intuïtief moet een opsluitingspotentiaal het condensaat stabiel maken, terwijl rotatie het omgekeerde effect zou hebben, met allerlei verschillende mogelijke verhoudingen tussen de twee. Later in dit werk wanneer vortices geïntroduceerd worden zal $\omega_r = 0$ genomen worden om het aantal variabelen te reduceren en om de nadruk te leggen op de onderliggende effecten. In de huidige minder complexe berekeningen wordt nu wel ω_r steeds meegenomen en worden verschillende verhoudingen tot de rotatiefrequenties ω_σ beschouwd. De rotatie- en opsluitingsfrequenties worden in eenheden van $\omega_F = E_F/\hbar$ weergegeven. In de eerste figuur (13) wordt Δ als functie van de inverse verstrooiingslengte $(k_F a_s)^{-1}$ geplotted voor verschillende waarden van de rotatiefrequentie van beide componenten $\omega = \omega_\uparrow = \omega_\downarrow$. De opsluitingsfrequentie wordt voor deze grafiek steeds van dezelfde orde genomen als de rotatiefrequentie $\omega_r = \omega$. Het lijkt er inderdaad op dat rotatie het condensaat minder stabiel maakt aan de BCS kant van de crossover, terwijl dit effect zwakker is aan de BEC kant. Om de berekeningen computationeel te versnellen is hier een kleine $k_F R = 2$ genomen. Een kleinere straal verzwakt de verschillen tussen de grafieken bij verschillende rotatiefrequenties en een grotere straal versterkt ze.

Figuur (14) toont het verloop van Δ voor verschillende rotatiefrequenties maar op een vaste opsluitingsfrequentie ω_r . Het effect is kwalitatief gelijkaardig als in (13) maar het is niet verrassend dat de grotere opsluitingsfrequentie het condensaat stabiel maakt.

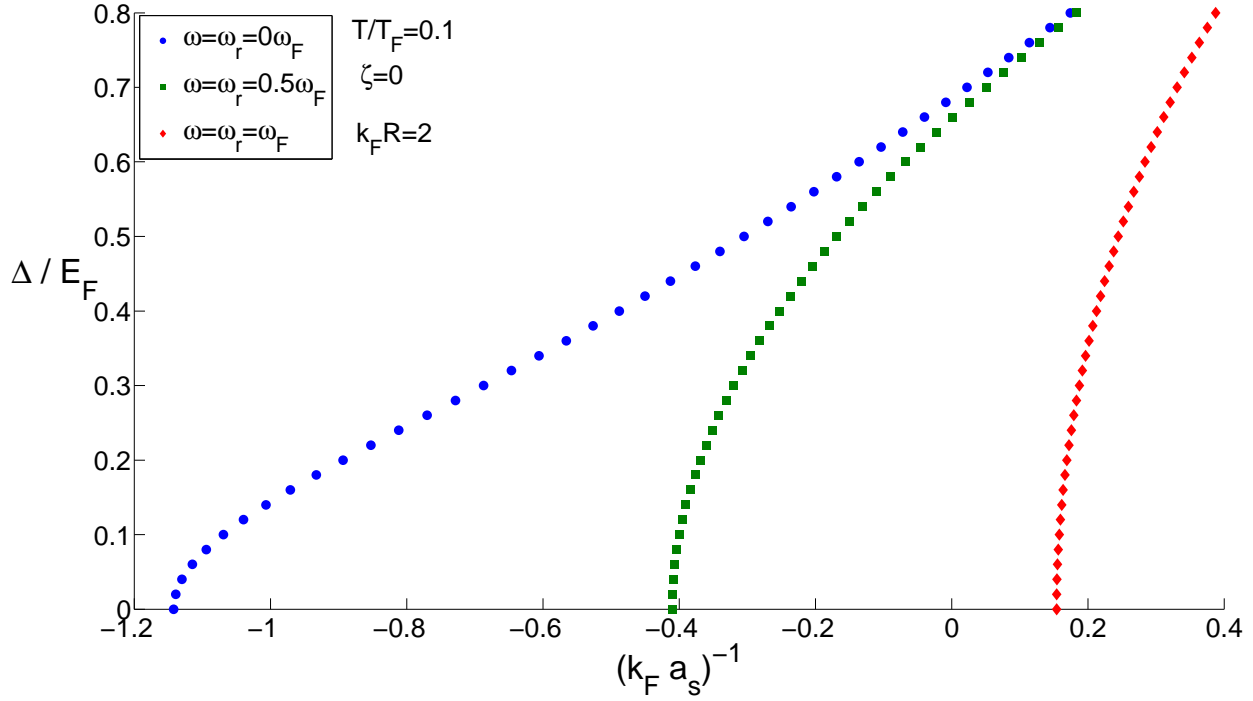
Uiteindelijk wordt in figuur (15) enkel de opwaartse spincomponent geroteerd $\omega_\uparrow = 0.5E_F$ terwijl de neerwaartse spincomponent geen rotatie ondervindt $\omega_\downarrow = 0$. Uit de vergelijking van de $(k_F a_s)^{-1}$ waarden

waarvoor $\Delta = 0$ voor $\omega = 0.5\omega_F$ in figuren (14) en (15) is duidelijk te zien dat voor $\zeta = 0$ de rotatie van beide componenten meer instabiliteit veroorzaakt in de superfluïde toestand. Dit is op het eerste zicht onverwacht daar de asymmetrische rotatie de paarvorming tussen de fermionische deeltjes moeilijker zou moeten maken. In de uitdrukkingen (2.43) en (2.44) is te zien dat de rotatie in twee verschillende termen zal opdruken in de vorm van een lokale onbalans evenredig met $(\omega_\uparrow + \omega_\downarrow)$ en een lokale chemische potentiaal evenredig met $(\omega_\uparrow - \omega_\downarrow)$. Indien ter vereenvoudiging $\omega_r = 0$ genomen wordt, kunnen deze variabelen geschreven worden als:

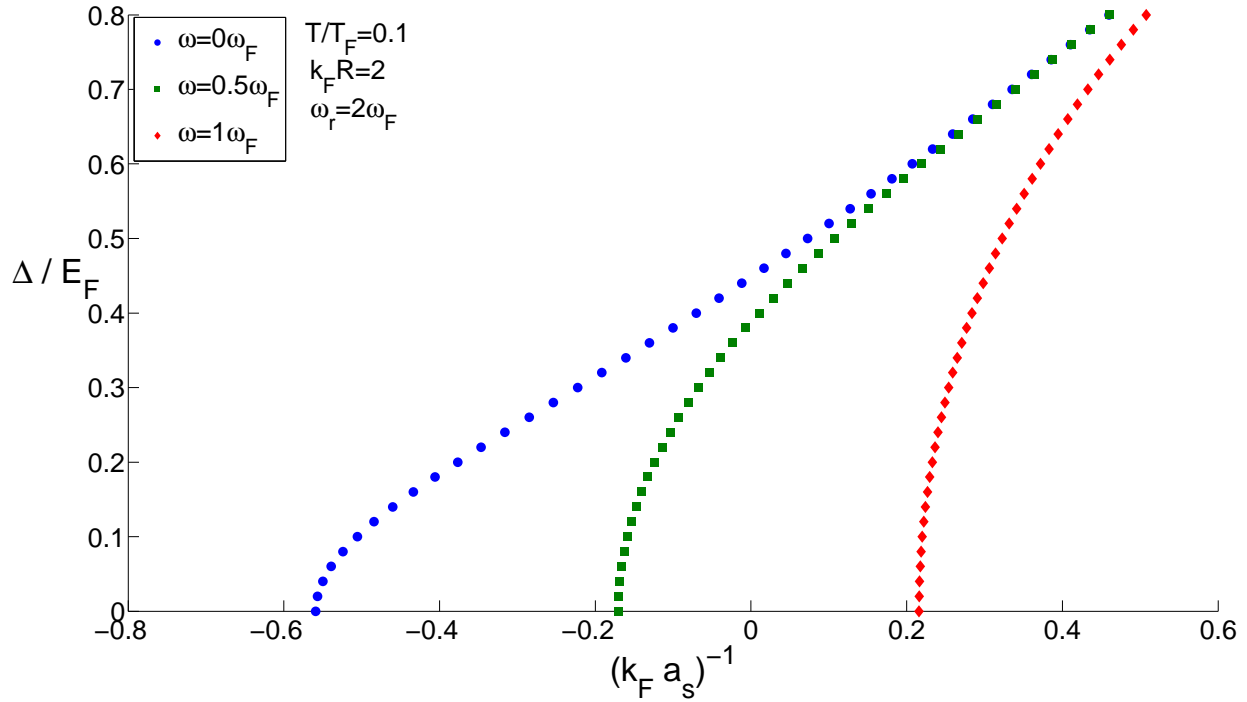
$$\zeta_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \zeta_0 + (\omega_\uparrow + \omega_\downarrow) k r \cos(\theta), \quad (2.62)$$

$$\mu_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \mu_0 + (\omega_\uparrow - \omega_\downarrow) k r \cos(\theta). \quad (2.63)$$

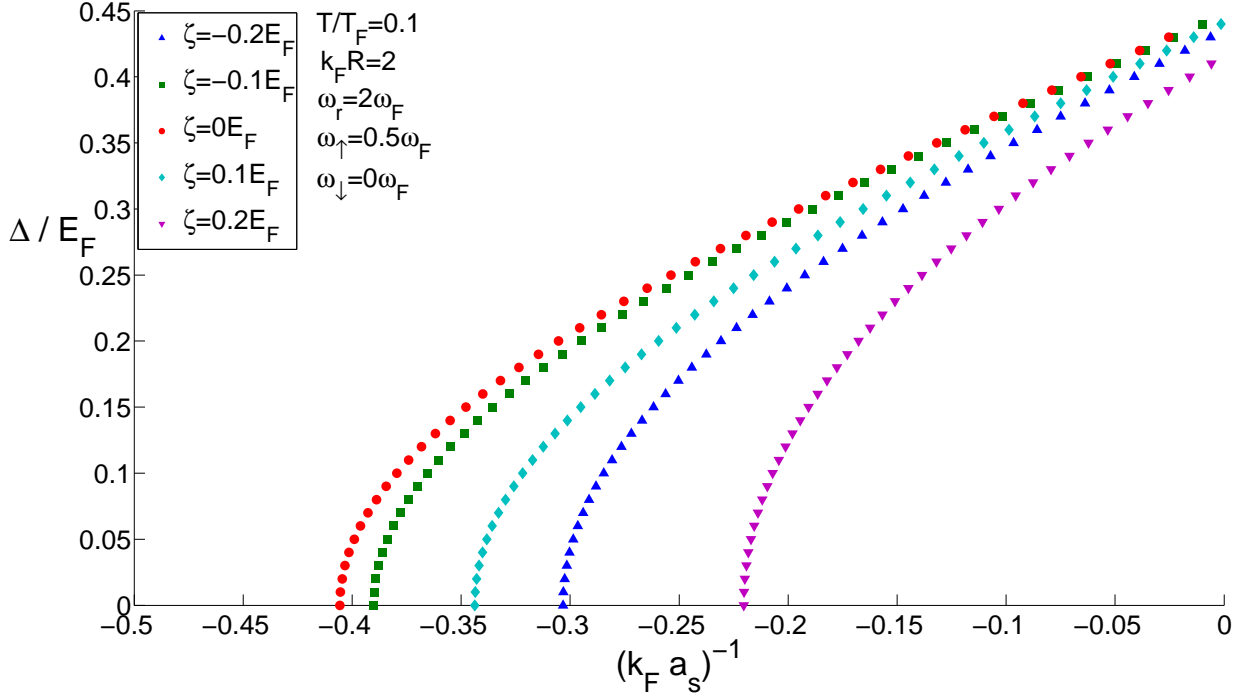
Omdat het uit figuren (13) en (14) volgt dat rotatie van beide componenten een toename in instabiliteit veroorzaakt, is de nefaste invloed van rotatie op de superfluiditeit te wijten aan de $(\omega_\uparrow + \omega_\downarrow)$ onbalans-term. Dit heeft er mee te maken dat wanneer de rotatie aangezet wordt minder fermionische paren in rust kunnen vormen in het labstelsel wat dus weergegeven wordt in de $(\omega_\uparrow + \omega_\downarrow)$ afhankelijkheid van de onbalans term. Bij individuele rotatie van een component zal deze term slechts voor de helft meetellen en die oorzaak van instabiliteit wordt hierbij verzwakt. Het is dus in deze context eventueel geschikter om ω_\uparrow met $\omega/2$ te vergelijken. Dit is niet helemaal correct omwille van de aanwezigheid van de voorheen niet bijdragende $(\omega_\uparrow - \omega_\downarrow)$ term in de lokale chemische potentiaal wat voor afzonderlijke instabiliteit kan zorgen. Dit wordt weergegeven in figuur (16) waarop te zien is dat indien $(\omega_\uparrow + \omega_\downarrow)$ constant gehouden wordt, voor grote waarden van $(\omega_\uparrow - \omega_\downarrow)$ de superfluïde toestand ook minder stabiel wordt. Voor deze figuur is ook de overgang gemaakt op een harde-wand container om de tegenwerkende effecten van rotatie en de harmonische val uit te sluiten. Verder is op figuur (15) te zien wat het effect van een globale onbalans is voor deze ééncomponentenrotatie. Dit wordt in de discussie op het einde van dit werk in meer detail besproken. Netto is een onbalans steeds onvoordelig daar op figuur (15) de Δ oplossing voor $\zeta = 0$ het verst naar de BCS kant als functie van $(k_F a_s)^{-1}$ blijft bestaan. De asymmetrie in de rotatie is duidelijk zichtbaar wanneer grafieken voor tegengestelde waarden van ζ vergeleken worden. Een overschot aan deeltjes met opwaartse spin zorgt voor een sterkere instabiliteit dan een overschot aan deeltjes met neerwaartse spin, wat volledig te verwachten is wanneer enkel de opwaartse spincomponent geroteerd wordt.



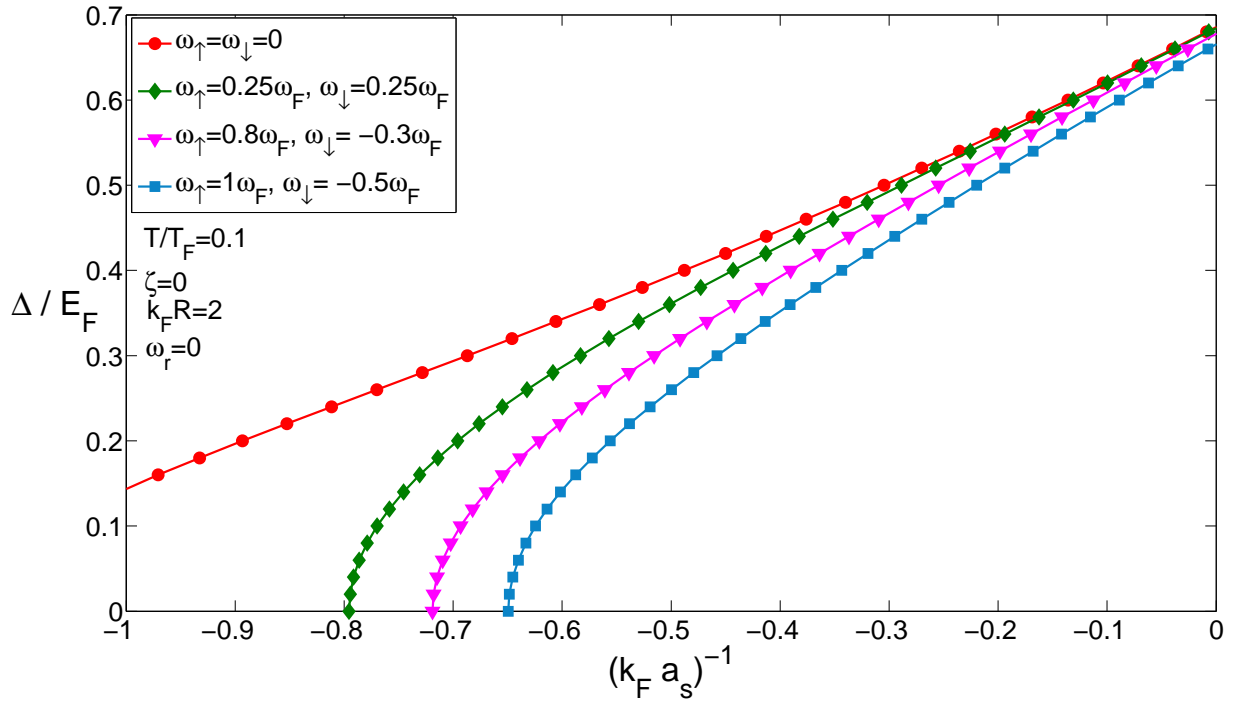
Figuur 13: Δ als functie van $(k_F a_s)^{-1}$ voor verschillende waarden van een gelijke rotatiefrequentie $\omega = \omega_{\uparrow} = \omega_{\downarrow} = 0, 1, 1.5E_F$.



Figuur 14: Δ als functie van $(k_F a_s)^{-1}$ voor verschillende waarden van een gelijke rotatiefrequentie $\omega = \omega_{\uparrow} = \omega_{\downarrow} = 0, 1, 1.5E_F$ voor $\zeta = 0$ bij een constante opsluitingsfrequentie ω_r .



Figuur 15: Δ als functie van $(k_F a_s)^{-1}$ voor ééncomponentrotatie met $\omega_\uparrow = 0.5\omega_F$ en $\omega_\downarrow = 0$ voor verschillende waarden van $\zeta_0 = [-0.2, 0, 2]E_F$.



Figuur 16: Verschillende plots van Δ als functie van $(k_F a_s)^{-1}$ bij een vaste $(\omega_\uparrow + \omega_\downarrow)$ maar voor toenemende waarden van $(\omega_\uparrow - \omega_\downarrow)$.

3 Effectieve veldentheorie

3.1 Inleiding

In het vorige deel werd het Fermi gas beschouwd in de zadelpuntsbenadering. Dit wilt zeggen dat de bandkloof-parameter Δ constant genomen werd over heel het condensaat. Terwijl dit geen slechte behandeling is om de algemene stabiliteit van het condensaat te toetsen, kan het onmogelijk structuren zoals vortices of solitonen beschrijven. Daarvoor is het namelijk belangrijk om de energetische kost van de gradiënten van de ordeparameter mee te nemen. Deze fluctuaties voorbij de zadelpuntsbenadering werden tot op tweede orde gradiënten in ruimte en tijd in [33] voor het vrije Fermi gas afgeleid. Deze bestaan uit zogenaamde kwantumdruk bijdragen in gradiënten van de dichtheid en in bijdragen ten gevolge van een snelheidsveld gerelateerd aan de gradiënten van de fase. De gradiënten in de fase blijven ook belangrijk ver van de rotatie-as in de context van vortices. De expansie resulteerde in een effectieve veldentheorie (EFT) voor het Fermi gas die verscheidene fenomenen zoals solitonen, vortices, en elementaire excitaties succesvol kon beschrijven. In [36] werd deze afleiding in de LDA benadering uitgebreid om een rotatie van beide componenten van het condensaat mee te nemen waarmee de eigenschappen van vortices langs de BEC-BCS crossover bestudeerd konden worden. Effecten van rotatie werden hier enkel tot op eerste orde in de gradiënten meegenomen om de belangrijke $-\omega L_z$ rotatieterm in het bosonisch veld te vinden. In deze sectie zal deze afleiding aangepast worden om een rotatie van de twee spincomponenten op verschillende frequenties mee te nemen. Omdat deze afleiding voor een groot deel gelijkaardig verloopt aan [33], [36] zal hier enkel nadruk gelegd worden op de delen waar de aanwezigheid van de verschillende rotatiefrequenties van belang is. Dit zal resulteren in nieuwe termen in de EFT wanneer de rotatiefrequenties van elkaar verschillen. In de volgende sectie wordt dit resultaat gebruikt om de vortexstructuur in detail te bestuderen.

De afleiding steunt op de local density benadering waardoor het belangrijk is om hier wat aandacht aan te besteden. Het totale volume van de container zal in afzonderlijke subvolumes gepartitioneerd worden, gelabeld met de posities $\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N$. Indien elk volume van de orde van de paarcorrelatielengte is, leveren de correlatie effecten tussen de verschillende volumes slechts een kleine bijdrage. De veranderingen in de macroscopische bijdragen van rotatie in de vectorpotential $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ en de opsluitingspotential $V(\mathbf{r})$ zijn belangrijk over afstanden van de grootte orde van de container. Indien de container dus steeds groter als de typische correlatielengte genomen wordt, kunnen per LDA volume element op positie \mathbf{R}_i de macroscopische variabelen op de constante waarden $\mathbf{A}(\mathbf{R}_i)$ en $V(\mathbf{R}_i)$ behandeld worden. De bijdrage van elk LDA elementje wordt dan afzonderlijk berekend waarover de integratie achteraf de totale actie levert. De gradiënten van beide functies schalen met de frequentie en daarom is deze benadering voornamelijk nauwkeurig op lage frequenties. Verder begint de correlatielengte sterk te groeien in de BCS limiet en is het ook te verwachten dat deze benadering nauwkeuriger moet zijn aan de BEC kant van de crossover. Concreet gebeurt de LDA op de volgende manier:

$$S \approx \sum_{\mathbf{R}_i} S_{\mathbf{R}_i} = \sum_{\mathbf{R}_i} \int_{V(\mathbf{R}_i)} d\mathbf{r} Q(\mathbf{r}, \mathbf{A}(\mathbf{R}_i), V(\mathbf{R}_i)), \quad (3.1)$$

waarbij Q de actiedichtheid is afgeleid onder de LDA aanname dat \mathbf{A} en V constant zijn. In dat geval mag het opnieuw variabel maken van deze macroscopische constanten geen sterk verschil geven, waardoor de actie ook berekend kan worden als:

$$S \approx \sum_{\mathbf{R}_i} \int_{\mathbf{R}_i} d\mathbf{r} Q(\mathbf{r}, \mathbf{A}(\mathbf{r}), V(\mathbf{r})). \quad (3.2)$$

Deze laatste stap was nodig om de actie over het totale volume V uiteindelijk eenvoudig te kunnen evalueren als.

$$S = \int_V d\mathbf{r} Q(\mathbf{r}, \mathbf{A}(\mathbf{r}), V(\mathbf{r})). \quad (3.3)$$

Uitdrukkingen (3.1) en (3.3) wijzen er dus op dat binnen deze benadering het voldoende is om de actiedichtheid af te leiden onder de aanname van constante rotatie- en opsluitingspotentialen en vervolgens over deze dichtheid met variabele potentialen te integreren.

De volgende drie subsecties (3.2-3.4) bevatten de technische details van de gradiënt expansie van de actie. De Greense functies worden opgesteld en de bijkomende termen in de actie ten gevolge van componentsgewijze rotatie worden afgeleid. De resulterende actie en de vrije energie zijn te vinden in subsectie (3.5) op het einde van dit hoofdstuk.

3.2 Greense functies

In het vorige hoofdstuk over de zadelpuntsbenadering gebeurden reeds enkele berekeningen met de actie. Na de Hubbard-Stratonovich transformatie werd de partitiesom in (2.19) gegeven door:

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\psi \int \mathcal{D}\Psi \exp \left[- \int_0^\beta d\tau \int d\mathbf{r} \left(\bar{\eta}_{\mathbf{r},\tau} [-\mathbb{G}_{\mathbf{r},\tau}^{-1}] \eta_{\mathbf{r},\tau} - \frac{\Psi_{\mathbf{r},\tau}^* \Psi_{\mathbf{r},\tau}}{g} \right) \right], \quad (3.4)$$

waarbij

$$-\mathbb{G}_{\mathbf{r},\tau}^{-1} = \begin{pmatrix} \partial_\tau - \nabla_{\mathbf{r}}^2 - \mu_\uparrow(\mathbf{r}) + 2i\mathbf{A}_\uparrow(\mathbf{r}) \cdot \nabla_{\mathbf{r}} + \mathbf{A}_\uparrow^2 & 0 \\ 0 & \partial_\tau + \nabla_{\mathbf{r}}^2 + \mu_\downarrow(\mathbf{r}) + 2i\mathbf{A}_\downarrow(\mathbf{r}) \cdot \nabla_{\mathbf{r}} - \mathbf{A}_\downarrow^2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -\Psi_{\mathbf{r},\tau} \\ -\Psi_{\mathbf{r},\tau}^* & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.5)$$

De twee termen in de som worden genoteerd als:

$$-\mathbb{G}_0^{-1}(\mathbf{r}, \tau) = \begin{pmatrix} \partial_\tau - \nabla_{\mathbf{r}}^2 - \mu_\uparrow(\mathbf{r}) + 2i\mathbf{A}_\uparrow(\mathbf{r}) \cdot \nabla_{\mathbf{r}} + \mathbf{A}_\uparrow^2 & 0 \\ 0 & \partial_\tau + \nabla_{\mathbf{r}}^2 + \mu_\downarrow(\mathbf{r}) + 2i\mathbf{A}_\downarrow(\mathbf{r}) \cdot \nabla_{\mathbf{r}} - \mathbf{A}_\downarrow^2 \end{pmatrix}, \quad (3.6)$$

en

$$\mathbb{F}(\mathbf{r}, \tau) = \begin{pmatrix} 0 & -\Psi_{\mathbf{r},\tau} \\ -\Psi_{\mathbf{r},\tau}^* & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.7)$$

Het is zinvol om hier de Fourier representatie van de Greense functie $\mathbb{G}_0(\mathbf{r}, \tau | \mathbf{r}', \tau')$ af te leiden die moet voldoen aan:

$$\int d\mathbf{y} \int dt \mathbb{G}_0^{-1}(\mathbf{r}, \tau | \mathbf{y}, t) \mathbb{G}_0(\mathbf{y} - \mathbf{r}', t - \tau') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(\tau - \tau'), \quad (3.8)$$

waar translatieinvariantie in de LDA gebruikt werd. Na het invullen van de Fourier transformatie van de Greense functie en de deltafuncties:

$$\frac{1}{\beta V} \sum_{\mathbf{k}, n} \int d\mathbf{y} \int dt \mathbb{G}_0^{-1}(\mathbf{r}, \tau | \mathbf{y}, t) \mathbb{G}_0(\mathbf{k}, n) e^{i\mathbf{k}(\mathbf{y}-\mathbf{r}')-i\omega_n(t-\tau')} = \frac{1}{\beta V} \sum_{\mathbf{k}, n} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')-i\omega_n(\tau-\tau')}. \quad (3.9)$$

Merk op dat ω_n de fermionische Matsubara frequenties zijn, daar \mathbb{G} inwerkt op de fermionische velden. De spinor diagonaalcomponenten van de matrix \mathbb{G}_0^{-1} kunnen gedefinieerd worden als:

$$\begin{aligned} \mathbb{G}_{0,1}^{-1}(\mathbf{r}, \tau | \mathbf{y}, t) &= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{y}) \delta(\tau - t) [-\partial_t + \nabla_{\mathbf{y}}^2 + \mu_{\uparrow} - 2i\mathbf{A}_{\uparrow} \cdot \nabla_{\mathbf{y}} - \mathbf{A}_{\uparrow}^2], \\ \mathbb{G}_{0,2}^{-1}(\mathbf{r}, \tau | \mathbf{y}, t) &= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{y}) \delta(\tau - t) [-\partial_t - \nabla_{\mathbf{y}}^2 - \mu_{\downarrow} - 2i\mathbf{A}_{\downarrow} \cdot \nabla_{\mathbf{y}} + \mathbf{A}_{\downarrow}^2]. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Deze uitdrukkingen zijn natuurlijk niet diagonaal in de plaatsvariabele \mathbf{x} . Omdat (3.6) diagonaal is in de spinor variabelen zal \mathbb{G}_0 dit ook zijn en wordt (3.9) componentsgewijs:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{\beta V} \sum_{\mathbf{k}, n} \int d\mathbf{y} \int dt \delta(\mathbf{r} - \mathbf{y}) \delta(\tau - t) (i\omega_n - k^2 + \mu_{\uparrow} + 2\mathbf{A}_{\uparrow} \cdot \mathbf{k} - \mathbf{A}_{\uparrow}^2) \mathbb{G}_{0,1}(\mathbf{k}, n) e^{i\mathbf{k}(\mathbf{y}-\mathbf{r}')-i\omega_n(t-\tau')} \\ &= \frac{1}{\beta V} \sum_{\mathbf{k}, n} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')-i\omega_n(\tau-\tau')}, \end{aligned} \quad (3.11)$$

en

$$\begin{aligned} &\frac{1}{\beta V} \sum_{\mathbf{k}, n} \int d\mathbf{y} \int dt \delta(\mathbf{r} - \mathbf{y}) \delta(\tau - t) (i\omega_n + k^2 - \mu_{\downarrow} + 2\mathbf{A}_{\downarrow} \cdot \mathbf{k} + \mathbf{A}_{\downarrow}^2) \mathbb{G}_{0,2}(\mathbf{k}, n) e^{i\mathbf{k}(\mathbf{y}-\mathbf{r}')-i\omega_n(t-\tau')} \\ &= \frac{1}{\beta V} \sum_{\mathbf{k}, n} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')-i\omega_n(\tau-\tau')}. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Na het toepassen van de deltafuncties in de integralen:

$$\mathbb{G}_0(\mathbf{k}, n) = \begin{pmatrix} \frac{1}{i\omega_n - k^2 + \mu_{\uparrow} + 2\mathbf{A}_{\uparrow} \cdot \mathbf{k} - \mathbf{A}_{\uparrow}^2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{i\omega_n + k^2 - \mu_{\downarrow} + 2\mathbf{A}_{\downarrow} \cdot \mathbf{k} + \mathbf{A}_{\downarrow}^2} \end{pmatrix}, \quad (3.13)$$

waarbij de notatie die ingevoerd werd in hoofdstuk 2 van dit werk gebruikt wordt:

$$V_{\sigma}(\mathbf{r}) = \frac{(\omega_r^2 - \omega_{\sigma}^2)r^2}{4} + \frac{\omega_z^2 z^2}{4}, \quad (3.14)$$

$$\mu_{\sigma}(\mathbf{r}) = \mu_{\sigma,0} - V_{\sigma}(\mathbf{r}), \quad (3.15)$$

$$\mu_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_{\uparrow}(\mathbf{r}) + \mu_{\downarrow}(\mathbf{r})}{2} + (\mathbf{A}_{\uparrow} - \mathbf{A}_{\downarrow}) \cdot \mathbf{k} - \frac{\mathbf{A}_{\downarrow}^2 + \mathbf{A}_{\uparrow}^2}{2}, \quad (3.16)$$

$$\zeta_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_{\uparrow}(\mathbf{r}) - \mu_{\downarrow}(\mathbf{r})}{2} + (\mathbf{A}_{\uparrow} + \mathbf{A}_{\downarrow}) \cdot \mathbf{k} - \frac{\mathbf{A}_{\uparrow}^2 - \mathbf{A}_{\downarrow}^2}{2}, \quad (3.17)$$

$$\xi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = k^2 - \mu_{\mathbf{k}}. \quad (3.18)$$

Ook hier is het belangrijk om te benadrukken dat door de keuze van de definities van $\mu_{\sigma}(\mathbf{r})$ de \mathbf{A}_{σ}^2 bijdragen wegvallen. De positieafhankelijkheid van deze variabelen is enkel een gevolg van $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ en

$V(\mathbf{r})$ en kan volgens de redenering in de inleiding weggelaten worden. Door gebruik te maken van deze variabelen wordt (3.13) compact geschreven als:

$$\mathbb{G}_0(\mathbf{k}, n) = \begin{pmatrix} \frac{1}{i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}} + \zeta_{\mathbf{k}}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{i\omega_n + \xi_{\mathbf{k}} + \zeta_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix}. \quad (3.19)$$

Dit resultaat zal later van pas komen. Nu de nodige bouwstenen afgeleid zijn, moet een andere aanpak gehanteerd worden om de afleiding van de effectieve veldentheorie op te stellen. Het fermionische deel van partitiesom (3.4) wordt gegeven door:

$$\int \mathcal{D}\psi \exp \left[- \int_0^\beta d\tau \int d\mathbf{r} (\bar{\eta}_{\mathbf{r},\tau} [-\mathbb{G}_{\mathbf{r},\tau}^{-1}] \eta_{\mathbf{r},\tau}) \right]. \quad (3.20)$$

Door de Nambu spinoren uit te schrijven, alle Grassmann variabelen in een vector \mathbf{v} te plaatsen en de integratiemaat te veranderen wordt (3.20) in deze andere aanpak gegeven door:

$$\chi \int \mathcal{D}\psi \exp [-\bar{\mathbf{v}} [-\mathbb{G}^{-1}] \mathbf{v}] = \chi \det [-\mathbb{G}^{-1}], \quad (3.21)$$

waarbij $-\mathbb{G}^{-1}$ de metamatrix is over alle posities en tijden van de spin-matrices. Dit is steeds mogelijk voor kwadratische acties en de vector \mathbf{v} is bijgevolg zodanig opgebouwd opdat dit gelijk is aan (3.20). De matrix met een index $-\mathbb{G}_{\mathbf{r},\tau}^{-1}$ is dus een 2×2 plaats-en tijdafhankelijke spinor-matrix terwijl de matrix $-\mathbb{G}^{-1}$ deze afhankelijkheid in afzonderlijke matrixelementen meeneemt. De determinant wordt hier dan ook van deze oneindig-dimensionele metamatrix genomen. De extra factor χ ontstaat vanwege de wissels in de Grassmann variabelen, maar zal in de verdere berekeningen geen rol spelen. Dit argument zou evenzeer in reciproke ruimte gemaakt kunnen worden waar het meer rigoureuus is vanwege de discrete aard van de variabelen. Verder kan aangetoond worden dat:

$$\det [-\mathbb{G}^{-1}] = \exp [\text{Tr} (\log [-\mathbb{G}^{-1}])]. \quad (3.22)$$

Door deze resultaten te gebruiken kan (3.4) herschreven worden als:

$$\mathcal{Z} = \chi \int \mathcal{D}\Psi \exp \left[\int_0^\beta d\tau \int d\mathbf{r} \frac{|\Psi_{\mathbf{r},\tau}|^2}{g} + \text{Tr} (\log [-\mathbb{G}^{-1}]) \right]. \quad (3.23)$$

De actie is bijgevolg gelijk aan:

$$S = S_B - \text{Tr} (\log [-\mathbb{G}^{-1}]), \quad (3.24)$$

waarbij S_B gegeven wordt door

$$S_B = - \frac{|\Psi_{\mathbf{r},\tau}|^2}{g}. \quad (3.25)$$

3.3 Bijdrage van de eerste orde ruimtelijke expansie aan de actie

Na de substitutie van (3.5) reduceert (3.24) zich tot:

$$\begin{aligned}
S &= S_B - \text{Tr} \left(\log \left[-\mathbb{G}_0^{-1} + \mathbb{F} \right] \right), \\
&= S_B - \text{Tr} \left(\log \left[-\mathbb{G}_0^{-1} (\mathbf{1} - \mathbb{G}_0 \mathbb{F}) \right] \right), \\
&= S_B - \text{Tr} \left(\log \left[-\mathbb{G}_0^{-1} \right] \right) - \text{Tr} \left(\log \left[\mathbf{1} - \mathbb{G}_0 \mathbb{F} \right] \right), \\
&= S_B + S_0 + \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{p} \text{Tr} \left[(\mathbb{G}_0 \mathbb{F})^p \right], \\
&= S_B + S_0 + \sum_{p=1}^{\infty} S_{\Psi}^{(p)}. \tag{3.26}
\end{aligned}$$

De matrix \mathbb{F} is de veralgemening van de 2×2 spinor-matrix $\mathbb{F}(\mathbf{r}, \tau)$ in (3.7) naar de oneindig-dimensionele metamatrix, analoog aan de bespreking voor $-\mathbb{G}_0^{-1}$. Door expliciet het spoor uit te schrijven over alle posities en tijden, rekening houdend met het feit dat \mathbb{F} diagonaal is in $x = (\mathbf{r}, \tau)$:

$$S_{\Psi}^{(p)} = \frac{1}{p} \int dx_1 \dots \int dx_p \text{Tr} \left[\mathbb{G}_0(x_1 - x_2) \mathbb{F}(x_2) \mathbb{G}_0(x_2 - x_3) \mathbb{F}(x_3) \dots \mathbb{G}_0(x_p - x_1) \mathbb{F}(x_1) \right]. \tag{3.27}$$

Hier is $x = (\mathbf{r}, \tau)$ een notationale plaatshouder voor ruimte en tijd, en zijn de matrices binnen het spoor terug de 2×2 matrices gedefinieerd door (3.6) en (3.7) in de vorige subsectie. Deze stap vereist wat rekenwerk om na te gaan dat het spoor van de metamatrices gedefinieerd in (3.21) zich op deze manier reduceert naar de Nambu matrices in (3.27), maar vereist verder geen speciale methodes buiten matrixalgebra. In de afleiding van de EFT wordt aangenomen dat Ψ een traag variërende functie is en wordt \mathbb{F} tot op tweede orde in ruimte en eerste orde in tijd geëxpandeerd:

$$\mathbb{F}(\mathbf{r}_1 + \Delta \mathbf{r}, \tau_1 + \Delta \tau) = \mathbb{F}(\mathbf{r}_1, \tau_1) + \nabla \mathbb{F}(\mathbf{r}_1, \tau_1) \cdot \Delta \mathbf{r} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \frac{\partial^2 \mathbb{F}(\mathbf{r}_1, \tau_1)}{\partial x_{\alpha} \partial x_{\beta}} \Delta x_{\alpha} \Delta x_{\beta} + \frac{\partial \mathbb{F}(\mathbf{r}_1, \tau_1)}{\partial \tau} \Delta \tau. \tag{3.28}$$

Door dit in de actieterm (3.27) te substitueren wordt een reeks termen verkregen in respectievelijk de verschillende ordes van de expansie. Een volledige uitdrukking wordt in [33] berekend voor een niet-roterend vrij Fermi gas en zal verder in dit werk gegeven worden. Wegens de voorgaande LDA bespreking kunnen deze termen hergebruikt worden met een genormaliseerde $\mu_{\mathbf{k}}$ en $\zeta_{\mathbf{k}}$. De symmetriebreuk zal echter aanleiding geven tot nieuwe termen die in [33] niet aanwezig zijn. De reden voor deze termen is dat terwijl de aanname van een constante \mathbf{A} geldig is in de LDA, de kruistermen $\mathbf{A} \cdot \mathbf{k}$ niet constant zijn in de reciproke ruimte. Dit zal in de laagste orde resulteren in bijkomende lineaire $\nabla \mathbb{F}$ bijdragen. Om deze termen te berekenen wordt oorspronkelijk een gelijkaardige aanpak als in [33] voor de tweede orde termen gebruikt, maar de berekening zal naarmate de afleiding vordert verschillen. Het is bijgevolg illustratief om de volledige afleiding van deze termen vanaf het begin te geven. De eerste stap is een coördinatentransformatie in (3.27):

$$x_1 = x, \tag{3.29}$$

$$x_l \rightarrow x + x'_l, \quad \text{voor } l \neq 1 \tag{3.30}$$

wat resulteert in:

$$S_{\Psi}^{(p)} = \frac{1}{p} \int dx \dots \int dx_p \text{Tr} [\mathbb{G}_0(x - x_2) \mathbb{F}(x + x'_2) \mathbb{G}_0(x_2 - x_3) \mathbb{F}(x + x'_3) \dots \mathbb{G}_0(x_p - x) \mathbb{F}(x)]. \quad (3.31)$$

In de \mathbb{G}_0 matrices en in de integratiematen blijven voorlopig de oorspronkelijke coördinaten staan en wordt er dus een gemengde notatie gebruikt. De laagste orde rotatie effecten voorbij de renormalisatie van de thermodynamische variabelen $\mu_{\mathbf{k}}$ en $\zeta_{\mathbf{k}}$ zijn vervat in de eerste orde ruimtelijke expansie. De EFT termen lineair in de gradiënten volgen uit de eerste orde expansie van \mathbb{F} :

$$S_{\Psi}^{(p)} = \frac{1}{p} \int dx \dots \int dx_p \text{Tr} [\mathbb{F}(x) \mathbb{G}_0(x - x_2) (\mathbb{F}(x) + \nabla \mathbb{F}(x) \mathbf{r}'_2) \mathbb{G}_0(x_2 - x_3) (\mathbb{F}(x) + \nabla \mathbb{F}(x) \mathbf{r}'_3) \dots \mathbb{G}_0(x_p - x)], \quad (3.32)$$

De matrix $\mathbb{F}(x)$ werd cyclisch naar voor gepermuterd in het spoor. Enkel de termen waar $\nabla \mathbb{F}$ slechts één keer voorkomt worden geselecteerd:

$$\begin{aligned} S_{\Psi}^{(p)} &= \frac{1}{p} \int dx \dots \int dx_p \text{Tr} [\mathbb{F}(x) \mathbb{G}_0(x - x_2) \nabla \mathbb{F}(x) \mathbf{r}'_2 \mathbb{G}_0(x_2 - x_3) \mathbb{F}(x) \dots \mathbb{G}_0(x_p - x)] \\ &+ \frac{1}{p} \int dx \dots \int dx_p \text{Tr} [\mathbb{F}(x) \mathbb{G}_0(x - x_2) \mathbb{F}(x) \mathbb{G}_0(x_2 - x_3) \nabla \mathbb{F}(x) \mathbf{r}'_3 \dots \mathbb{G}_0(x_p - x)] \\ &+ \dots \end{aligned} \quad (3.33)$$

Vervolgens wordt er nog een coördinatentransformatie gedaan:

$$\begin{aligned} x_2 &= x + y_2, \\ x_3 &= x_2 + y_3, \\ x_i &= x_{i-1} + y_i = x + \sum_{j=2}^i y_j, \\ x_p &= x + y_2 + y_3 \dots + y_p, \end{aligned} \quad (3.34)$$

waardoor (3.33) herschreven wordt als:

$$\begin{aligned} S_{\Psi}^{(p)} &= \frac{1}{p} \int dx \dots \int dx_p \text{Tr} [\mathbb{F}(x) \mathbb{G}_0(-y_2) \nabla \mathbb{F}(x) \mathbf{y}_2 \mathbb{G}_0(-y_3) \mathbb{F}(x) \dots \mathbb{G}_0(y_2 + y_3 \dots + y_p)] \\ &+ \frac{1}{p} \int dx \dots \int dx_p \text{Tr} [\mathbb{F}(x) \mathbb{G}_0(-y_2) \mathbb{F}(x) \mathbb{G}_0(-y_3) \nabla \mathbb{F}(x) (\mathbf{y}_2 + \mathbf{y}_3) \dots \mathbb{G}_0(y_2 + y_3 \dots + y_p)] \\ &+ \dots \end{aligned} \quad (3.35)$$

De Fourier representatie van $\mathbb{G}_0(x)$:

$$\mathbb{G}_0(\mathbf{r}, \tau) = \frac{1}{\beta V} \sum_{\mathbf{k}, n} \mathbb{G}_0(\mathbf{k}, n) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega_n \tau} \quad (3.36)$$

substitueren in (3.35) geeft:

$$\begin{aligned}
S_{\Psi}^{(p)} &= \frac{1}{p} \frac{1}{(\beta V)^p} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \dots, \mathbf{k}_p, n_1, n_2, \dots, n_p} \int dx \dots \int dx_p [\text{Tr} [\mathbb{F}(x) \mathbb{G}_0(\mathbf{k}_2, n_2) \nabla \mathbb{F}(x) \mathbf{y}_2 \mathbb{G}_0(\mathbf{k}_3, n_3) \mathbb{F}(x) \dots \mathbb{G}_0(\mathbf{k}_p, n_p)] \\
&+ \text{Tr} [\mathbb{F}(x) \mathbb{G}_0(\mathbf{k}_2, n_2) \mathbb{F}(x) \mathbb{G}_0(\mathbf{k}_3, n_3) \nabla \mathbb{F}(x) (\mathbf{y}_2 + \mathbf{y}_3) \dots \mathbb{G}_0(\mathbf{k}_1, n_1)] + \dots] e^{-i\mathbf{k}_2 \mathbf{y}_2 - i\mathbf{k}_3 \mathbf{y}_3 \dots - i\mathbf{k}_1 (\mathbf{y}_2 + \mathbf{y}_3 \dots + \mathbf{y}_p)} \\
&\times e^{-i\omega_{n_2}(\tau - \tau_2) - i\omega_{n_3}(\tau_2 - \tau_3) \dots - i\omega_{n_1}(\tau_p - \tau)}. \tag{3.37}
\end{aligned}$$

Ook hier wordt er een gemengde notatie gebruikt van oude en nieuwe coördinaten, maar de verschillende benamingen vermijden enige ambiguïteit. De maat van de integralen en tijdsvariabelen in de exponenten staat in dezelfde coördinaten. Hierdoor geven de integralen over τ_l deltafuncties van de vorm $\delta_{n_1=n_2}$, $\delta_{n_2=n_3}$ etc. De sommatie zet vervolgens alle n gelijk aan $n_1 = n$. Dit toepassen en terug overgaan op een expliciete notatie voor ruimte en tijd resulteert in:

$$\begin{aligned}
S_{\Psi}^{(p)} &= \frac{1}{p} \frac{1}{\beta V^p} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \dots, \mathbf{k}_p, n} \int d\mathbf{r} \dots \int d\mathbf{r}_p \int d\tau [\text{Tr} [\mathbb{F}(x) \mathbb{G}_0(\mathbf{k}_2, n) \nabla \mathbb{F}(x) \mathbf{y}_2 \mathbb{G}_0(\mathbf{k}_3, n) \mathbb{F}(x) \dots \mathbb{G}_0(\mathbf{k}_1, n)] \\
&+ \text{Tr} [\mathbb{F}(x) \mathbb{G}_0(\mathbf{k}_2, n) \mathbb{F}(x) \mathbb{G}_0(\mathbf{k}_3, n) \nabla \mathbb{F}(x) (\mathbf{y}_2 + \mathbf{y}_3) \dots \mathbb{G}_0(\mathbf{k}_1, n)] + \dots] e^{-i\mathbf{k}_2 \mathbf{y}_2 - i\mathbf{k}_3 \mathbf{y}_3 \dots - i\mathbf{k}_1 (\mathbf{y}_2 + \mathbf{y}_3 \dots + \mathbf{y}_p)}. \tag{3.38}
\end{aligned}$$

Door de operatoren $\hat{\mathbf{y}}_j = i\nabla_{\mathbf{k}_j}$ te introduceren kan (3.38) herschreven worden:

$$\begin{aligned}
S_{\Psi}^{(p)} &= \frac{1}{p} \frac{1}{\beta V^p} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \dots, \mathbf{k}_p, n} \int d\mathbf{r} \dots \int d\mathbf{r}_p \int d\tau [\text{Tr} [\mathbb{F}(x) \mathbb{G}_0(\mathbf{k}_2, n) \nabla \mathbb{F}(x) \hat{\mathbf{y}}_2 \mathbb{G}_0(\mathbf{k}_3, n) \mathbb{F}(x) \dots \mathbb{G}_0(\mathbf{k}_1, n)] \\
&+ \text{Tr} [\mathbb{F}(x) \mathbb{G}_0(\mathbf{k}_2, n) \mathbb{F}(x) \mathbb{G}_0(\mathbf{k}_3, n) \nabla \mathbb{F}(x) (\hat{\mathbf{y}}_2 + \hat{\mathbf{y}}_3) \dots \mathbb{G}_0(\mathbf{k}_1, n)] + \dots] e^{-i\mathbf{k}_2 \mathbf{y}_2 - i\mathbf{k}_3 \mathbf{y}_3 \dots - i\mathbf{k}_1 (\mathbf{y}_2 + \mathbf{y}_3 \dots + \mathbf{y}_p)}. \tag{3.39}
\end{aligned}$$

De eerste term van de som binnen het spoor in (3.39) kan eerst afzonderlijk beschouwd worden. Eerst wordt de integratie over alle \mathbf{r}_i behalve \mathbf{r} uitgevoerd:

$$\begin{aligned}
S_{\Psi}^{(p,1)} &= \frac{1}{p} \frac{1}{\beta V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \dots, \mathbf{k}_p, n} \int d\mathbf{r} \int d\tau [\text{Tr} [\mathbb{F}(x) \mathbb{G}_0(\mathbf{k}_2, n) \nabla \mathbb{F}(x) \hat{\mathbf{y}}_2 \mathbb{G}_0(\mathbf{k}_3, n) \mathbb{F}(x) \dots \mathbb{G}_0(\mathbf{k}_1, n)] \\
&\delta(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3) \times \delta(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4) \dots \delta(\mathbf{k}_p - \mathbf{k}_1)]. \tag{3.40}
\end{aligned}$$

De sommatie over alle \mathbf{k} , behalve \mathbf{k}_2 en \mathbf{k}_1 wordt uitgevoerd en de Kronecker-delta's worden toegepast:

$$S_{\Psi}^{(p,1)} = \frac{1}{p} \frac{1}{\beta V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, n} \int d\mathbf{r} \int d\tau [\text{Tr} [\mathbb{F}(x) \mathbb{G}_0(\mathbf{k}_2, n) \nabla \mathbb{F}(x) \hat{\mathbf{y}}_2 \mathbb{G}_0(\mathbf{k}_3, n) \mathbb{F}(x) \dots \mathbb{G}_0(\mathbf{k}_1, n)] \delta(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1)]. \tag{3.41}$$

Een eigenschap die in de volgende stap nodig is volgt uit partiële integratie:

$$\int dx f(x) \partial_x \delta(x - a) = -f'(a). \tag{3.42}$$

Hiermee is het duidelijk dat in (3.41) de gradiënt op de deltafunctie resulteert in een extra minteken en de voorwaarde $\mathbf{k} = \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_1$:

$$S_{\Psi}^{(p,1)} = -\frac{1}{p} \frac{1}{\beta V} \sum_{\mathbf{k},n} \int \mathbf{dr} \int d\tau [\text{Tr} [\mathbb{F}(x) \hat{\mathbf{y}}_2 \mathbb{G}_0(\mathbf{k}_2, n) |_{\mathbf{k}_2=\mathbf{k}} \nabla \mathbb{F}(x) \mathbb{G}_0(\mathbf{k}, n) \mathbb{F}(x) \dots \mathbb{G}_0(\mathbf{k}, n)]] . \quad (3.43)$$

Dezelfde redenering kan toegepast worden op de andere termen in de sommatie binnen het spoor:

$$S_{\Psi}^{(p)} = -\frac{1}{p} \frac{1}{\beta V} \sum_{\mathbf{k},n} \int \mathbf{dr} \int d\tau [\text{Tr} [\hat{\mathbf{y}}_2 \mathbb{F}(x) \mathbb{G}_0(\mathbf{k}_2, n) \nabla \mathbb{F}(x) \mathbb{G}_0(\mathbf{k}_3, n) \mathbb{F}(x) \dots \mathbb{G}_0(\mathbf{k}_1, n)] |_{\mathbf{k}_1=\mathbf{k}_2=\mathbf{k}_3=\dots=\mathbf{k}} \\ + \text{Tr} [(\hat{\mathbf{y}}_2 + \hat{\mathbf{y}}_3) \mathbb{F}(x) \mathbb{G}_0(\mathbf{k}_2, n) \mathbb{F}(x) \mathbb{G}_0(\mathbf{k}_3, n) \nabla \mathbb{F}(x) \dots \mathbb{G}_0(\mathbf{k}_1, n)] |_{\mathbf{k}_1=\mathbf{k}_2=\mathbf{k}_3=\dots=\mathbf{k}} + \dots] . \quad (3.44)$$

Nu wordt in de eerste term van (3.44) een cyclische permutatie met een verschuiving van twee plaatsen uitgevoerd:

$$\begin{aligned} 1 &\rightarrow p-1, \\ 2 &\rightarrow p, \\ 3 &\rightarrow 1, \\ 4 &\rightarrow 2, \\ p &\rightarrow p-1. \end{aligned} \quad (3.45)$$

Een verschuiving met drie in de tweede term:

$$\begin{aligned} 1 &\rightarrow p-2, \\ 2 &\rightarrow p-1, \\ 3 &\rightarrow p, \\ 4 &\rightarrow 1, \\ &\dots \\ p &\rightarrow p-3. \end{aligned} \quad (3.46)$$

etc. Door hierna het deel van de matrixvermenigvuldiging dat na $\nabla \mathbb{F}$ volgt steeds van voor in het spoor te zetten resulteert de actie in:

$$S_{\Psi}^{(p)} = -\frac{1}{p} \frac{1}{\beta V} \sum_{\mathbf{k},n} \int \mathbf{dr} \int d\tau \text{Tr} [(\hat{\mathbf{y}}_p) + (\hat{\mathbf{y}}_p + \hat{\mathbf{y}}_{p-1}) + \dots + (\hat{\mathbf{y}}_p + \hat{\mathbf{y}}_{p-1} + \dots + \hat{\mathbf{y}}_2)] \\ [\mathbb{G}_0(\mathbf{k}_1, n) \mathbb{F}(x) \mathbb{G}_0(\mathbf{k}_2, n) \mathbb{F}(x) \dots \mathbb{G}_0(\mathbf{k}_p, n) \nabla \mathbb{F}(x)] |_{\mathbf{k}_1=\mathbf{k}_2=\mathbf{k}_3=\dots=\mathbf{k}} . \quad (3.47)$$

Door dezelfde operatoren $\hat{\mathbf{y}}_j$ samen te nemen is het eenvoudig om te zien dat uiteindelijk de actie geschreven kan worden als:

$$S_{\Psi}^{(p)} = -\frac{1}{p} \frac{1}{\beta V} \sum_{\mathbf{k},n} \int \mathbf{dr} \int d\tau \sum_{s=1}^p (s-1) \hat{\mathbf{y}}_s \text{Tr} [\mathbb{G}_0(\mathbf{k}_1, n) \mathbb{F}(x) \mathbb{G}_0(\mathbf{k}_2, n) \mathbb{F}(x) \dots \mathbb{G}_0(\mathbf{k}_p, n) \nabla \mathbb{F}(x)] |_{\mathbf{k}_1=\mathbf{k}_2=\dots=\mathbf{k}} . \quad (3.48)$$

Merk op dat de $s=1$ term hier niet meegenomen wordt, dus de sommatie bij $s=2$ beginnen mag ook.

3.4 Substitutie van de Greense functies

In deze subsectie worden de Greense functie $\mathbb{G}_0(\mathbf{k}, n)$ en de ordeparameter term $\mathbb{F}(x)$ zoals deze gedefinieerd zijn in (3.7) en (3.13) in de actie (3.48) ingevuld. Vervolgens wordt de actie uitgerekend. Hiervoor is het praktisch om de veelvoorkomende matrixproducten afzonderlijk te berekenen.

$$\mathbb{G}_0(\mathbf{k}, n)\mathbb{F}(x) = \begin{pmatrix} 0 & \frac{-\Psi}{i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}} + \zeta_{\mathbf{k}}} \\ -\Psi^* & 0 \\ \frac{1}{i\omega_n + \xi_{\mathbf{k}} + \zeta_{\mathbf{k}}} & \end{pmatrix}, \quad (3.49)$$

$$\hat{\mathbf{y}}_s \mathbb{G}_0(\mathbf{k}_s, n) = i \nabla_{\mathbf{k}_s} \mathbb{G}_0(\mathbf{k}_s, n) = i \begin{pmatrix} \frac{2(\mathbf{k} - \mathbf{A}_\uparrow)}{(i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}} + \zeta_{\mathbf{k}})^2} & 0 \\ 0 & \frac{-2(\mathbf{k} + \mathbf{A}_\downarrow)}{(i\omega_n + \xi_{\mathbf{k}} + \zeta_{\mathbf{k}})^2} \end{pmatrix}, \quad (3.50)$$

$$\hat{\mathbf{y}}_s \mathbb{G}_0(\mathbf{k}_s, n)\mathbb{F}(x) = i \begin{pmatrix} 0 & \frac{-2\Psi(\mathbf{k} - \mathbf{A}_\uparrow)}{(i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}} + \zeta_{\mathbf{k}})^2} \\ \frac{2\Psi^*(\mathbf{k} + \mathbf{A}_\downarrow)}{(i\omega_n + \xi_{\mathbf{k}} + \zeta_{\mathbf{k}})^2} & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.51)$$

$$\hat{\mathbf{y}}_s \mathbb{G}_0(\mathbf{k}_s, n)\nabla\mathbb{F}(x) = i \begin{pmatrix} 0 & \frac{-2\nabla\Psi(\mathbf{k} - \mathbf{A}_\uparrow)}{(i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}} + \zeta_{\mathbf{k}})^2} \\ \frac{2\nabla\Psi^*(\mathbf{k} + \mathbf{A}_\downarrow)}{(i\omega_n + \xi_{\mathbf{k}} + \zeta_{\mathbf{k}})^2} & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.52)$$

$$(\mathbb{G}_0(\mathbf{k}, n)\mathbb{F}(x))^2 = \begin{pmatrix} \frac{|\Psi|^2}{(i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2} & 0 \\ 0 & \frac{|\Psi|^2}{(i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2} \end{pmatrix}. \quad (3.53)$$

De matrices in het spoor komen telkens in paren voor. Hierboven is te zien dat elk paar matrices die voorkomen in het spoor antidiagonaal zijn. Een oneven product van p antidiagonale matrices geeft steeds opnieuw een antidiagonale matrix. De termen met een oneven p dragen dus niet bij in het spoor. Hierdoor is het geschikter om over te gaan op $p = 2l$ voor de niet-nul bijdragen:

$$S_\Psi^{(2l)} = -\frac{1}{2l} \frac{1}{\beta V} \sum_{\mathbf{k}, n} \int \mathbf{d}\mathbf{r} \int d\tau \sum_{s=1}^p (s-1) \hat{\mathbf{y}}_s \text{Tr} [\mathbb{G}_0(\mathbf{k}_1, n)\mathbb{F}(x)\mathbb{G}_0(\mathbf{k}_2, n)\mathbb{F}(x)\dots\mathbb{G}_0(\mathbf{k}_p, n)\nabla\mathbb{F}(x)] |_{\mathbf{k}_1=\dots=\mathbf{k}} \quad (3.54)$$

Beschouw nu het product van de matrices binnen het spoor:

$$\begin{aligned} \mathbb{M} &= \mathbb{G}_0(\mathbf{k}, n)\mathbb{F}(x)\mathbb{G}_0(\mathbf{k}, n)\mathbb{F}(x)\dots\hat{\mathbf{y}}_s \mathbb{G}_0(\mathbf{k}_s, n)\mathbb{F}(x)\dots\mathbb{G}_0(\mathbf{k}, n)\nabla\mathbb{F}(x) \\ &= (\mathbb{G}_0(\mathbf{k}, n)\mathbb{F}(x))^{s-1} \hat{\mathbf{y}}_s \mathbb{G}_0(\mathbf{k}_s, n)\mathbb{F}(x) (\mathbb{G}_0(\mathbf{k}, n)\mathbb{F}(x))^{2l-s-1} \mathbb{G}_0(\mathbf{k}, n)\nabla\mathbb{F}(x). \end{aligned} \quad (3.55)$$

De gevallen voor een even en oneven s worden afzonderlijk behandeld.

Oneven s

Wanneer s oneven is, zijn zowel $s-1$ als $2l-s-1$ even. Voor een algemene exponent $2Q$ geldt er:

$$(\mathbb{G}_0(\mathbf{k}, n)\mathbb{F}(x))^{2Q} = [(\mathbb{G}_0(\mathbf{k}, n)\mathbb{F}(x))^2]^Q = \begin{pmatrix} \frac{(|\Psi|^2)^Q}{((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2)^Q} & 0 \\ 0 & \frac{(|\Psi|^2)^Q}{((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2)^Q} \end{pmatrix}, \quad (3.56)$$

wat voor de twee termen in \mathbb{M} betekent:

$$(\mathbb{G}_0(\mathbf{k}, n)\mathbb{F}(x))^{s-1} = \begin{pmatrix} \frac{(|\Psi|^2)^{(s-1)/2}}{((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2)^{(s-1)/2}} & 0 \\ 0 & \frac{(|\Psi|^2)^{(s-1)/2}}{((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2)^{(s-1)/2}} \end{pmatrix}, \quad (3.57)$$

en

$$(\mathbb{G}_0(\mathbf{k}, n)\mathbb{F}(x))^{2l-s-1} = \begin{pmatrix} \frac{(|\Psi|^2)^{(2l-s-1)/2}}{((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2)^{(2l-s-1)/2}} & 0 \\ 0 & \frac{(|\Psi|^2)^{(2l-s-1)/2}}{((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2)^{(2l-s-1)/2}} \end{pmatrix}. \quad (3.58)$$

Het matrixproduct (3.55) \mathbb{M} voor oneven s kan hiermee eenvoudig uitgerekend worden:

$$\mathbb{M}_{\text{odd}} = i \begin{pmatrix} \frac{2\Psi\nabla\Psi^*(\mathbf{k} - \mathbf{A}_{\uparrow})|\Psi|^{2(l-1)}}{((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2)^l (i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}} + \zeta_{\mathbf{k}})} & 0 \\ 0 & \frac{-2\Psi^*\nabla\Psi(\mathbf{k} + \mathbf{A}_{\downarrow})|\Psi|^{2(l-1)}}{((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2)^l (i\omega_n + \xi_{\mathbf{k}} + \zeta_{\mathbf{k}})} \end{pmatrix}. \quad (3.59)$$

Even s

Wanneer s even is, zijn $s - 1$ en $2l - s - 1$ oneven, maar $s - 2$ en $2l - s - 2$ wel even en dus:

$$\begin{aligned} (\mathbb{G}_0(\mathbf{k}, n)\mathbb{F}(x))^{s-1} &= (\mathbb{G}_0(\mathbf{k}, n)\mathbb{F}(x))^{s-2} (\mathbb{G}_0(\mathbf{k}, n)\mathbb{F}(x)) \\ &= \begin{pmatrix} 0 & \frac{-\Psi(|\Psi|^2)^{(s-2)/2}}{((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2)^{(s-2)/2} (i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}} + \zeta_{\mathbf{k}})} \\ \frac{-\Psi^*(|\Psi|^2)^{(s-2)/2}}{((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2)^{(s-2)/2} (i\omega_n + \xi_{\mathbf{k}} + \zeta_{\mathbf{k}})} & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.60)$$

en

$$\begin{aligned} (\mathbb{G}_0(\mathbf{k}, n)\mathbb{F}(x))^{2l-s-1} &= (\mathbb{G}_0(\mathbf{k}, n)\mathbb{F}(x))^{2l-s-2} (\mathbb{G}_0(\mathbf{k}, n)\mathbb{F}(x)) \\ &= \begin{pmatrix} 0 & \frac{-\Psi(|\Psi|^2)^{(2l-s-2)/2}}{((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2)^{(2l-s-2)/2} (i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}} + \zeta_{\mathbf{k}})} \\ \frac{-\Psi^*(|\Psi|^2)^{(2l-s-2)/2}}{((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2)^{(2l-s-2)/2} (i\omega_n + \xi_{\mathbf{k}} + \zeta_{\mathbf{k}})} & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.61)$$

Het matrixproduct \mathbb{M} uit (3.55) kan nu uitgerekend worden en resulteert in:

$$\mathbb{M}_{\text{even}} = i \begin{pmatrix} \frac{-2\Psi\nabla\Psi^*(\mathbf{k} + \mathbf{A}_\downarrow)|\Psi|^{2(l-1)}}{((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2)^l (i\omega_n + \xi_{\mathbf{k}} + \zeta_{\mathbf{k}})} & 0 \\ 0 & \frac{2\Psi^*\nabla\Psi(\mathbf{k} - \mathbf{A}_\uparrow)|\Psi|^{2(l-1)}}{((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2)^l (i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}} + \zeta_{\mathbf{k}})} \end{pmatrix}. \quad (3.62)$$

Deze afleiding voor een even s zou de speciale term waarbij $s = 2l$ kunnen missen, maar het uitrekenen hiervan:

$$(\mathbb{G}_0(\mathbf{k}, n)\mathbb{F}(x))^{2l-1} \hat{\mathbf{y}}_s \mathbb{G}_0(\mathbf{k}_s, n) \nabla \mathbb{F}(x), \quad (3.63)$$

toont aan dat ook deze term aan (3.62) gelijk is. Omdat de oneven termen (3.59) en de even termen (3.62) niet van s afhangen kunnen alle respectievelijke even en oneven contributies samengenomen worden. Het gewicht van elke term wordt in (3.48) duidelijk gegeven door:

$$\sum_{s=1, \text{even}}^{2l} (s-1) = l^2 \quad \text{and} \quad \sum_{s=1, \text{oneven}}^{2l} (s-1) = l(l-1). \quad (3.64)$$

De actie (3.48) reduceert zich tot:

$$S_\Psi^{(2l)} = -\frac{1}{2l} \frac{1}{\beta V} \sum_{\mathbf{k}, n} \int d\mathbf{r} \int d\tau [l^2 \text{Tr} [\mathbb{M}_{\text{even}}] + l(l-1) \text{Tr} [\mathbb{M}_{\text{odd}}]]. \quad (3.65)$$

De \mathbb{M} -matrices worden in uitdrukking (3.65) ingevuld waarna het spoor genomen wordt:

$$S_\Psi^{(2l)} = -\frac{i}{\beta V} \int d\tau \int d\mathbf{r} \sum_{\mathbf{k}, n} l \left[\frac{|\Psi|^{2(l-1)} \Psi^* \nabla \Psi(\mathbf{k} - \mathbf{A}_\uparrow)}{((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2)^l (i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}} + \zeta_{\mathbf{k}})} - \frac{|\Psi|^{2(l-1)} \Psi \nabla \Psi^*(\mathbf{k} + \mathbf{A}_\downarrow)}{((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2)^l (i\omega_n + \xi_{\mathbf{k}} + \zeta_{\mathbf{k}})} \right] \\ + (l-1) \left[\frac{|\Psi|^{2(l-1)} \Psi \nabla \Psi^*(\mathbf{k} - \mathbf{A}_\uparrow)}{((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2)^l (i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}} + \zeta_{\mathbf{k}})} - \frac{|\Psi|^{2(l-1)} \Psi^* \nabla \Psi(\mathbf{k} + \mathbf{A}_\downarrow)}{((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2)^l (i\omega_n + \xi_{\mathbf{k}} + \zeta_{\mathbf{k}})} \right]. \quad (3.66)$$

Door gebruik te maken van:

$$\nabla (|\Psi|^{2l}) = \nabla (\Psi^* \Psi)^l = l |\Psi|^{2(l-1)} ((\nabla \Psi^*) \Psi + (\Psi^*) \nabla \Psi), \quad (3.67)$$

kunnen de eerste twee termen en het l -deel van de laatste twee termen op de volgende manier gecombineerd worden:

$$S_\Psi^{(2l)} = -\frac{i}{\beta V} \int d\tau \int d\mathbf{r} \sum_{\mathbf{k}, n} \left[\frac{\nabla (|\Psi|^2)^l (\mathbf{k} - \mathbf{A}_\uparrow)}{((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2)^l (i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}} + \zeta_{\mathbf{k}})} - \frac{\nabla (|\Psi|^2)^l (\mathbf{k} + \mathbf{A}_\downarrow)}{((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2)^l (i\omega_n + \xi_{\mathbf{k}} + \zeta_{\mathbf{k}})} \right] \\ - \left[\frac{|\Psi|^{2(l-1)} \Psi \nabla \Psi^*(\mathbf{k} - \mathbf{A}_\uparrow)}{((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2)^l (i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}} + \zeta_{\mathbf{k}})} - \frac{|\Psi|^{2(l-1)} \Psi^* \nabla \Psi(\mathbf{k} + \mathbf{A}_\downarrow)}{((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2)^l (i\omega_n + \xi_{\mathbf{k}} + \zeta_{\mathbf{k}})} \right]. \quad (3.68)$$

In de LDA zijn \mathbf{A} en V constant in het beschouwde integratievolume. In dit volume worden de integralen geëvalueerd voor een vrij Fermi gas op constante nieuwe waarden van $\mu_{\mathbf{k}}$ en $\zeta_{\mathbf{k}}$ met periodische randvoorwaarden. Hierdoor worden de eerste twee termen in (3.68) nul. De actie term wordt dan:

$$\begin{aligned}
S_{\Psi}^{(2l)} &= -\frac{i}{\beta V} \int d\tau \int d\mathbf{r} \sum_{\mathbf{k},n,l} \left[\frac{|\Psi|^{2(l-1)} \Psi^* \nabla \Psi(\mathbf{k} + \mathbf{A}_{\downarrow})}{((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2)^l (i\omega_n + \xi_{\mathbf{k}} + \zeta_{\mathbf{k}})} - \frac{|\Psi|^{2(l-1)} \Psi \nabla \Psi^*(\mathbf{k} - \mathbf{A}_{\uparrow})}{((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2)^l (i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}} + \zeta_{\mathbf{k}})} \right] \\
&= -\frac{i}{\beta V} \int d\tau \int d\mathbf{r} \sum_{\mathbf{k},n,l} \left[\frac{|\Psi|^{2(l-1)} \Psi^* \nabla \Psi(\mathbf{k} + \mathbf{A}_{\downarrow}) (i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}} + \zeta_{\mathbf{k}})}{((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2)^{l+1}} \right. \\
&\quad \left. - \frac{|\Psi|^{2(l-1)} \Psi \nabla \Psi^*(\mathbf{k} - \mathbf{A}_{\uparrow}) (i\omega_n + \xi_{\mathbf{k}} + \zeta_{\mathbf{k}})}{((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2)^{l+1}} \right]. \tag{3.69}
\end{aligned}$$

De actie term (3.69) wordt herschreven door de termen met $\xi_{\mathbf{k}}$ in de teller af te zonderen. Hiervan zijn nog eens de termen in $\xi_{\mathbf{k}} \mathbf{k}$ nul vanwege de $\nabla |\Psi|^{2l}$ nul-bijdrage in de LDA. Dit resulteert in:

$$\begin{aligned}
S_{\Psi}^{(2l)} &= \frac{i}{\beta V} \int d\tau \int d\mathbf{r} \sum_{\mathbf{k},n,l} \left[\frac{|\Psi|^{2(l-1)} (\Psi^* \nabla \Psi \mathbf{A}_{\downarrow} - \Psi \nabla \Psi^* \mathbf{A}_{\uparrow}) \xi_{\mathbf{k}}}{((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2)^{l+1}} \right] \\
&\quad - \frac{i}{\beta V} \int d\tau \int d\mathbf{r} \sum_{\mathbf{k},n,l} \left[\frac{|\Psi|^{2(l-1)} \Psi^* \nabla \Psi(\mathbf{k} + \mathbf{A}_{\downarrow}) (i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})}{((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2)^{l+1}} - \frac{|\Psi|^{2(l-1)} \Psi \nabla \Psi^*(\mathbf{k} - \mathbf{A}_{\uparrow}) (i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})}{((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2)^{l+1}} \right]. \tag{3.70}
\end{aligned}$$

Beschouw nu de volgende uitdrukking:

$$\int d\mathbf{r} f(\mathbf{k}, A, V) |\Psi|^{2(l-1)} \Psi \nabla \Psi^* = \frac{1}{l} \int d\mathbf{r} f(\mathbf{k}, A, V) \nabla \left[(|\Psi|^2)^l \right] - \int d\mathbf{r} f(\mathbf{k}, A, V) |\Psi|^{2(l-1)} \Psi^* \nabla \Psi \tag{3.71}$$

$$= - \int d\mathbf{r} f(\mathbf{k}, A, V) |\Psi|^{2(l-1)} \Psi^* \nabla \Psi, \tag{3.72}$$

waar de eerste term in (3.71) nul is om dezelfde reden als de termen in (3.68). Deze gelijkheid kan nu gebruikt worden op de volgende manier:

$$\begin{aligned}
&\int d\mathbf{r} |\Psi|^{2(l-1)} f(\mathbf{A}, V) (\Psi^* \nabla \Psi \mathbf{A}_{\downarrow} - \Psi \nabla \Psi^* \mathbf{A}_{\uparrow}) = \int d\mathbf{r} |\Psi|^{2(l-1)} f(\mathbf{A}, V) \Psi^* \nabla \Psi (\mathbf{A}_{\downarrow} + \mathbf{A}_{\uparrow}) \\
&= \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} |\Psi|^{2(l-1)} f(\mathbf{A}, V) \Psi^* \nabla \Psi (\mathbf{A}_{\downarrow} + \mathbf{A}_{\uparrow}) + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} |\Psi|^{2(l-1)} f(\mathbf{A}, V) \Psi^* \nabla \Psi (\mathbf{A}_{\downarrow} + \mathbf{A}_{\uparrow}) \\
&= \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} |\Psi|^{2(l-1)} f(\mathbf{A}, V) \Psi^* \nabla \Psi (\mathbf{A}_{\downarrow} + \mathbf{A}_{\uparrow}) - \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} |\Psi|^{2(l-1)} f(\mathbf{A}, V) \Psi \nabla \Psi^* (\mathbf{A}_{\downarrow} + \mathbf{A}_{\uparrow}) \\
&= \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} |\Psi|^{2(l-1)} f(\mathbf{A}, V) (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) (\mathbf{A}_{\downarrow} + \mathbf{A}_{\uparrow}), \tag{3.73}
\end{aligned}$$

waarbij (3.72) in elke stap gebruikt werd. Dit kan gebruikt worden om de eerste term in (3.70) te herschrijven:

$$\begin{aligned}
S_{\Psi}^{(2l)} &= \frac{i}{\beta V} \int d\tau \int d\mathbf{r} \sum_{\mathbf{k},n,l} \left[\frac{|\Psi|^{2(l-1)} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \cdot (\mathbf{A}_{\downarrow} + \mathbf{A}_{\uparrow}) \xi_{\mathbf{k}}}{2 ((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2)^{l+1}} \right] \\
&\quad - \frac{i}{\beta V} \int d\tau \int d\mathbf{r} \sum_{\mathbf{k},n,l} \sum_{\alpha} \left[\frac{|\Psi|^{2(l-1)} \Psi^* \nabla \Psi (\mathbf{k} + \mathbf{A}_{\downarrow}) (i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})}{((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2)^{l+1}} - \frac{|\Psi|^{2(l-1)} \Psi \nabla \Psi^* (\mathbf{k} - \mathbf{A}_{\uparrow}) (i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})}{((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2)^{l+1}} \right].
\end{aligned} \tag{3.74}$$

Dezelfde truk als in (3.73) wordt gebruikt om te vinden dat:

$$\int d\mathbf{r} |\Psi|^{2(l-1)} Q(\mathbf{A}, V) (\Psi^* \nabla \Psi \mathbf{A}_{\downarrow} + \Psi \nabla \Psi^* \mathbf{A}_{\uparrow}) = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} |\Psi|^{2(l-1)} Q(\mathbf{A}, V) (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) (\mathbf{A}_{\downarrow} - \mathbf{A}_{\uparrow}). \tag{3.75}$$

In de laatste twee termen van (3.74) worden de termen lineair in \mathbf{k} afgezonderd. Verder worden ook in de laatste twee termen van (3.74) de termen lineair in \mathbf{A} afgezonderd, waarna voor deze termen (3.75) gebruikt wordt:

$$\begin{aligned}
S_{\Psi}^{(2l)} &= \frac{i}{\beta V} \int d\tau \int d\mathbf{r} \sum_{\mathbf{k},n,l} \left[\frac{|\Psi|^{2(l-1)} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \cdot (\mathbf{A}_{\downarrow} + \mathbf{A}_{\uparrow}) \xi_{\mathbf{k}}}{2 ((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2)^{l+1}} \right] \\
&\quad + \frac{i}{\beta V} \int d\tau \int d\mathbf{r} \sum_{\mathbf{k},n,l} \left[\frac{|\Psi|^{2(l-1)} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \cdot (\mathbf{A}_{\uparrow} - \mathbf{A}_{\downarrow}) (i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})}{2 ((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2)^{l+1}} \right] \\
&\quad - \frac{i}{\beta V} \int d\tau \int d\mathbf{r} \sum_{\mathbf{k},n,l} \left[\frac{|\Psi|^{2(l-1)} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \cdot \mathbf{k} (i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})}{((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2)^{l+1}} \right].
\end{aligned} \tag{3.76}$$

De totale actie is gedefinieerd als:

$$S = S_B + S_0 + \sum_{l=1}^{\infty} S_{\Psi}^{(2l)} \tag{3.77}$$

Voor de totale bijdrage moet er dus nog over (3.76) gesommeerd worden. Hiervoor wordt de wel gekende machtreeks gebruikt ($\sum_{l=1}^{\infty} x^{l-1} = (1-x)^{-1}$), en na enige algebraïsche manipulatie wordt de actie:

$$\begin{aligned}
S_{\Psi} &= \frac{i}{\beta V} \int d\tau \int d\mathbf{r} \sum_{\mathbf{k},n} \left[\frac{(\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \cdot (\mathbf{A}_{\downarrow} + \mathbf{A}_{\uparrow}) \xi_{\mathbf{k}}}{2 ((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2) ((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - E_{\mathbf{k}}^2)} \right] \\
&\quad + \frac{i}{\beta V} \int d\tau \int d\mathbf{r} \sum_{\mathbf{k},n,l} \left[\frac{(\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \cdot (\mathbf{A}_{\uparrow} - \mathbf{A}_{\downarrow}) (i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})}{2 ((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2) ((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - E_{\mathbf{k}}^2)} \right] \\
&\quad - \frac{i}{\beta V} \int d\tau \int d\mathbf{r} \sum_{\mathbf{k},n,l} \left[\frac{(\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \cdot \mathbf{k} (i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})}{((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2) ((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - E_{\mathbf{k}}^2)} \right],
\end{aligned} \tag{3.78}$$

waarbij

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Psi|^2}. \quad (3.79)$$

Elke term in (3.78) zal respectievelijk naar verwezen worden als:

$$S_{\Psi} = S_{\Psi,1} + S_{\Psi,2} + S_{\Psi,3}. \quad (3.80)$$

De noemer in elke term van (3.78) kan ontbonden worden als:

$$\begin{aligned} \frac{1}{((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2) ((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - E_{\mathbf{k}}^2)} &= \frac{1}{|\Psi|^2} \left(\frac{1}{((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - E_{\mathbf{k}}^2)} - \frac{1}{((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2)} \right) \\ &= \frac{1}{|\Psi|^2} \left(\frac{1}{((\omega_n - i\zeta_{\mathbf{k}})^2 + \xi_{\mathbf{k}}^2)} - \frac{1}{((\omega_n - i\zeta_{\mathbf{k}})^2 + E_{\mathbf{k}}^2)} \right). \end{aligned} \quad (3.81)$$

Vervolgens kunnen de Matsubara sommaties gedefinieerd worden:

$$\frac{1}{\beta} \sum_n \frac{1}{((\omega_n - i\zeta)^2 + x^2)^s} = f_s(\beta, x, \zeta) \quad \text{en} \quad f_1(\beta, x, \zeta) = \frac{1}{2x} \frac{\sinh(\beta x)}{\cosh(\beta x) + \cosh(\beta \zeta)}. \quad (3.82)$$

De eerste term wordt door (3.81) en (3.82):

$$S_{\Psi,1} = \frac{i}{V} \int d\tau \int d\mathbf{r} \sum_{\mathbf{k}} \left[(\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \cdot \frac{(\mathbf{A}_{\downarrow} + \mathbf{A}_{\uparrow})}{2} \xi_{\mathbf{k}} \right] \frac{1}{|\Psi|^2} (f_1(\beta, \xi_{\mathbf{k}}, \zeta_{\mathbf{k}}) - f_1(\beta, E_{\mathbf{k}}, \zeta_{\mathbf{k}})). \quad (3.83)$$

De sommatie over \mathbf{k} wordt vervangen door een continue integraal en hiermee wordt de uiteindelijke uitdrukking voor $S_{\Psi,1}$:

$$S_{\Psi,1} = i \int d\tau \int d\mathbf{r} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^\nu} \left[(\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \cdot \frac{(\mathbf{A}_{\downarrow} + \mathbf{A}_{\uparrow})}{2} \xi_{\mathbf{k}} \right] \frac{1}{|\Psi|^2} (f_1(\beta, \xi_{\mathbf{k}}, \zeta_{\mathbf{k}}) - f_1(\beta, E_{\mathbf{k}}, \zeta_{\mathbf{k}})). \quad (3.84)$$

Het kan aangetoond worden dat de Matsubara sommaties die voorkomen in term twee en drie van (3.78) gelijk zijn aan:

$$\frac{1}{\beta} \sum_n \left(\frac{i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}}}{((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - E_{\mathbf{k}}^2) ((i\omega_n + \zeta_{\mathbf{k}})^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2)} \right) = \frac{\zeta_{\mathbf{k}}}{|\Psi|^2} (f_1(\beta, \zeta_{\mathbf{k}}, E_{\mathbf{k}}) - f_1(\beta, \zeta_{\mathbf{k}}, \xi_{\mathbf{k}})). \quad (3.85)$$

Door (3.85) wordt de tweede term:

$$S_{\Psi,2} = i \int d\tau \int d\mathbf{r} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^\nu} \left[(\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \cdot \frac{(\mathbf{A}_{\downarrow} - \mathbf{A}_{\uparrow})}{2} \zeta_{\mathbf{k}} \right] \frac{1}{|\Psi|^2} (f_1(\beta, \zeta_{\mathbf{k}}, \xi_{\mathbf{k}}) - f_1(\beta, \zeta_{\mathbf{k}}, E_{\mathbf{k}})), \quad (3.86)$$

en de derde term:

$$S_{\Psi,3} = i \int d\tau \int d\mathbf{r} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^\nu} [(\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \cdot \mathbf{k} \zeta_{\mathbf{k}}] \frac{1}{|\Psi|^2} (f_1(\beta, \zeta_{\mathbf{k}}, \xi_{\mathbf{k}}) - f_1(\beta, \zeta_{\mathbf{k}}, E_{\mathbf{k}})). \quad (3.87)$$

De eerste term $S_{\Psi,1}$ is de term die aanwezig is bij een rotatie van beide componenten op dezelfde frequenties. Wanneer hier de rotaties $\mathbf{A}_\uparrow = \mathbf{A}_\downarrow$ gelijkgesteld worden, reduceert deze term zich tot exact de D -term uit [36]. De tweede term bevat $\mathbf{A}_\downarrow - \mathbf{A}_\uparrow$ en is enkel aanwezig bij verschillende rotatiefrequenties en komt hierdoor niet voor in [36]. De laatste term $S_{\Psi,3}$ is een hogere orde correctie en geeft problemen met ijk-invariantie [36]. Net zoals in [36] zal deze term verder niet meegenomen worden. De conclusie van dit deel is dat door het roteren van de componenten op verschillende frequenties er in laagste orde drie nieuwe EFT termen bijkomen vergeleken met het vrije Fermi gas:

$$S_{\Psi,1} = i \int d\tau \int d\mathbf{r} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^\nu} \left[(\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \cdot \frac{(\mathbf{A}_\downarrow + \mathbf{A}_\uparrow)}{2} \xi_{\mathbf{k}} \right] \frac{1}{|\Psi|^2} (f_1(\beta, \xi_{\mathbf{k}}, \zeta_{\mathbf{k}}) - f_1(\beta, E_{\mathbf{k}}, \zeta_{\mathbf{k}})), \quad (3.88)$$

$$S_{\Psi,2} = i \int d\tau \int d\mathbf{r} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^\nu} \left[(\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \cdot \frac{(\mathbf{A}_\downarrow - \mathbf{A}_\uparrow)}{2} \zeta_{\mathbf{k}} \right] \frac{1}{|\Psi|^2} (f_1(\beta, \zeta_{\mathbf{k}}, \xi_{\mathbf{k}}) - f_1(\beta, \zeta_{\mathbf{k}}, E_{\mathbf{k}})), \quad (3.89)$$

$$S_{\Psi,3} = i \int d\tau \int d\mathbf{r} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^\nu} [(\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \cdot \mathbf{k} \zeta_{\mathbf{k}}] \frac{1}{|\Psi|^2} (f_1(\beta, \zeta_{\mathbf{k}}, \xi_{\mathbf{k}}) - f_1(\beta, \zeta_{\mathbf{k}}, E_{\mathbf{k}})). \quad (3.90)$$

Hiervan is de eerste term een veralgemening van een reeds gekende EFT term bij de rotatie van beide componenten, de tweede term is een nieuwe term in de EFT ten gevolge van componentsgewijze rotatie en de laatste term wordt niet meegenomen.

3.5 Volledige actie en de vrije energie

De termen (3.88), (3.89) en (3.90) zijn het resultaat van een eerste orde expansie in de ruimtelijke gradiënt van de effectieve velden in de volledige actie (3.26). Deze eerste orde termen zijn niet aanwezig in de oorspronkelijke afleiding van de EFT voor een vrij Fermi gas. Het was bijgevolg nodig om voor deze termen de volledige afleiding te maken. Natuurlijk zijn er ook nog de nulde-orde bijdragen en de tweede orde ruimtelijke gradiënt bijdragen, maar deze worden allemaal berekend in [33]. De nulde orde bijdrage werd ook in dit werk in het tweede hoofdstuk berekend in de zadelpuntsbenadering. Deze termen kunnen hier allemaal overgenomen worden indien de gerenormaliseerde variabelen $\mu_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ en $\zeta_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ in de LDA meegenomen worden, voorbij dat punt verschillen de afleidingen immers niet. Omdat in dit werk enkel stationaire toestanden beschouwd worden, komen de tijdsafgeleiden van de velden niet aan bod. De volledige actie tot op tweede orde wordt gegeven door:

$$F = \frac{S}{\beta} = \int d\mathbf{r} \left(\Omega_s(w) + C |\nabla \Psi|^2 - E(\nabla w)^2 + i \left[D \left(\frac{\mathbf{A}_\uparrow + \mathbf{A}_\downarrow}{2} \right) + U \left(\frac{\mathbf{A}_\downarrow - \mathbf{A}_\uparrow}{2} \right) \right] \cdot (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \right) + i \int d\mathbf{r} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^\nu} [(\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \cdot \mathbf{k} \zeta_{\mathbf{k}}] \frac{1}{|\Psi|^2} (f_1(\beta, \zeta_{\mathbf{k}}, \xi_{\mathbf{k}}) - f_1(\beta, \zeta_{\mathbf{k}}, E_{\mathbf{k}})). \quad (3.91)$$

De τ -variabele werd hier wegens de stationaire toestand uitgeïntegreerd, en zoals eerder besproken zal de laatste term in F weggelaten worden. De coëfficiënten binnen de volume integraal met $w = |\Psi|^2$ worden gegeven door:

$$\Omega_s(w) = - \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left(\frac{1}{\beta} \ln (2 \cosh(\beta E_{\mathbf{k}}) + 2 \cosh(\beta \zeta_{\mathbf{k}})) - \xi_{\mathbf{k}} - \frac{w}{2k^2} \right) - \frac{w}{8\pi k_F a_s}, \quad (3.92)$$

$$C = \frac{2}{3} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} k^2 f_2(\beta, E_{\mathbf{k}}, \zeta_{\mathbf{k}}), \quad (3.93)$$

$$E = \frac{4}{3} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} k^2 \xi_{\mathbf{k}}^2 f_4(\beta, E_{\mathbf{k}}, \zeta_{\mathbf{k}}), \quad (3.94)$$

$$D = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{w} [f_1(\beta, \xi_{\mathbf{k}}, \zeta_{\mathbf{k}}) - f_1(\beta, E_{\mathbf{k}}, \zeta_{\mathbf{k}})], \quad (3.95)$$

$$U = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{\zeta_{\mathbf{k}}}{w} [f_1(\beta, \zeta_{\mathbf{k}}, \xi_{\mathbf{k}}) - f_1(\beta, \zeta_{\mathbf{k}}, E_{\mathbf{k}})]. \quad (3.96)$$

Merk ook op dat deze coëfficiënten allemaal positieafhankelijk zijn. De hogere orde Matsubara functies zijn gedefinieerd door:

$$f_{p+1}(\beta, \epsilon, \zeta) = -\frac{1}{2p\epsilon} \frac{\partial f_p(\beta, \epsilon, \zeta)}{\partial \epsilon}. \quad (3.97)$$

4 Vortices

4.1 Een variationele aanpak

In dit hoofdstuk zal de EFT gebruikt worden om de structuur en stabiliteit van vortices te bestuderen voor zowel gezamenlijke rotatie als rotatie van slechts één individuele component van het Fermi gas. Het gas zal opgesloten zitten in een cilindrische container met straal R zonder harmonische opsluitingspotentiaal, waardoor in de verdere delen steeds $\omega_r = \omega_z = 0$. Een algemene functie die een vortex in het centrum van de container beschrijft kan geschreven worden als:

$$\Psi(\mathbf{r}) = |\Psi_\infty| a(\mathbf{r}) e^{iS(\mathbf{r})}. \quad (4.1)$$

De functie $a(\mathbf{r})$ moet ver weg van de vortex naar 1 gaan als $|\Psi_\infty| = \Delta_{sp}$ gegeven wordt door de waarde van de ordeparameter in de zadelpuntsbenadering. Deze waarde $\Delta_{sp} = \Delta_{sp}(\omega_\uparrow, \omega_\downarrow)$ wordt dus voor elke beschouwde frequentie afzonderlijk berekend door de bandkloof vergelijking en de vergelijking voor het deeltjesaantal uit het tweede hoofdstuk op te lossen. Voor een vortex langs de z-as geeft de variationele ansatz $a(r) = \tanh(r/R_v)$ en $S(\mathbf{r}) = \phi$ (hoek in het xy-vlak) vergeleken met Monte-Carlo berekeningen zeer goede resultaten zolang de spin-onbalans niet groot is [44]. De oorspronkelijke variationele functie is bijgevolg:

$$\Psi(\mathbf{r}) = |\Psi_\infty| \tanh\left(\frac{r}{R_v}\right) e^{i\phi}. \quad (4.2)$$

Dikwijls wordt hier ook een andere schaal $R_v \rightarrow \sqrt{2}R_v$ gebruikt. De factoren in de vrije energie worden eenvoudig uitgerekend:

$$\nabla\Psi \cdot \nabla\Psi^* = |\Psi_\infty|^2 \left(\frac{\partial a(r)}{\partial r} e^{i\phi}, \frac{a(r)}{r} i e^{i\phi}, 0 \right) \cdot \left(\frac{\partial a(r)}{\partial r} e^{-i\phi}, -\frac{a(r)}{r} i e^{-i\phi}, 0 \right) \quad (4.3)$$

$$= |\Psi_\infty|^2 \left[\left(\frac{\partial a(r)}{\partial r} \right)^2 + \frac{a(r)^2}{r^2} \right] = |\Psi_\infty|^2 \left[\frac{1}{R_v^2} \operatorname{sech}^4\left(\frac{r}{R_v}\right) + \frac{1}{r^2} \tanh^2\left(\frac{r}{R_v}\right) \right], \quad (4.4)$$

$$(\nabla w)^2 = 4a(r)^2 |\Psi_\infty|^4 \left(\frac{\partial a(r)}{\partial r} \right)^2 = \frac{4|\Psi_\infty|^4}{R_v^2} \tanh^2\left(\frac{r}{R_v}\right) \operatorname{sech}^4\left(\frac{r}{R_v}\right), \quad (4.5)$$

$$(\Psi^* \nabla\Psi - \Psi \nabla\Psi^*) = 2|\Psi_\infty|^2 \frac{ia(r)^2}{r} \mathbf{e}_\phi = \frac{2i|\Psi_\infty|^2}{r} \tanh^2\left(\frac{r}{R_v}\right) \mathbf{e}_\phi. \quad (4.6)$$

Het is geschikt om op een gerenormaliseerde vrije energie $F_e = F_v - F_0$ over te gaan waarbij F_v de vrije energie (3.91) voor de variationele functie is en F_0 dezelfde vrije energie voor een homogeen condensaat zonder vortices is. Gezien F_0 niet afhankelijk is van de variationele parameter R_v verandert dit niets aan het gevonden minimum. Deze verschuiving zorgt er wel voor dat minima in R_v stabiele vortextoestanden zijn wanneer $F_e < 0$ maar dat bij $F_e > 0$ de toestand zonder vortices energetisch voordeliger is. Deze effectieve vrije energie wordt gegeven door:

$$F_e = F_v - F_0 = \int d\mathbf{r} \left(\Omega_s(w) - \Omega_s(|\Psi_\infty|^2) + C |\nabla\Psi|^2 - E(\nabla w)^2 + i \left[D \left(\frac{\mathbf{A}_\uparrow + \mathbf{A}_\downarrow}{2} \right) + U \left(\frac{\mathbf{A}_\downarrow - \mathbf{A}_\uparrow}{2} \right) \right] \cdot (\Psi^* \nabla\Psi - \Psi \nabla\Psi^*) \right). \quad (4.7)$$

De uitgewerkte termen (4.6) kunnen ingevuld worden:

$$F_{\text{eff}} = F_v - F_0 = \int d\mathbf{r} \left(\Omega_s(w) - \Omega_s(|\Psi_\infty|^2) + C|\Psi_\infty|^2 \left[\left(\frac{\partial a(r)}{\partial r} \right)^2 + \frac{a(r)^2}{r^2} \right] - E|\Psi_\infty|^4 4a(r)^2 \left(\frac{\partial a(r)}{\partial r} \right)^2 \right. \\ \left. - \left[D \left(\frac{\mathbf{A}_\uparrow + \mathbf{A}_\downarrow}{2} \right) + U \left(\frac{\mathbf{A}_\downarrow - \mathbf{A}_\uparrow}{2} \right) \right] \cdot \mathbf{e}_\phi |\Psi_\infty|^2 \frac{2a(r)^2}{r} \right). \quad (4.8)$$

4.2 Analytische minimalisering

4.2.1 Coëfficiënten in zadelpuntsbenadering

De vrije energie F_e (4.8) is een functie van de variationele vortex straal R_v . In dit geval kan de vrije energie dikwijls analytisch geminimaliseerd door de herschaling $r \rightarrow r'R_v$ te maken. Hierdoor komt de R_v afhankelijkheid als een voorfactor in elke coëfficiënt en reduceert het probleem zich tot een extremalisatie van een polynoom. Deze methode zou werken voor een variationele extremalisatie van bijvoorbeeld de Gross-Pitaevskii en de Ginzburg-Landau vrije energiën. In de vrije energie (4.8) zijn de coëfficiënten echter zelf plaatsafhankelijk, een herschaling op deze manier zou de R_v afhankelijkheid gewoonweg verplaatsen. Het is dus niet mogelijk om de vrije energie analytisch te minimaliseren. De numerieke minimalisatie zal in een latere subsectie volgen maar eerst is het interessant om te zien met welke benaderingen toch een analytische uitdrukking voor R_v gevonden kan worden. Eerst moeten de genormaliseerde thermodynamische variabelen overal benaderd worden door hun globale waarde in de zadelpuntsbenadering:

$$\mu_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \rightarrow \mu_{sp}, \quad (4.9)$$

$$\zeta_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \rightarrow \zeta_{sp}. \quad (4.10)$$

$$(4.11)$$

De parameter ζ_{sp} is een externe waarde en moet niet afzonderlijk berekend worden. De parameter μ_{sp} wordt hier voor elke frequentie afzonderlijk berekend in de zadelpuntsbenadering. Deze bevat impliciet informatie over de effecten van rotatie op de stabiliteit daar in de zadelpuntsbenadering de volledige $\mu_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ en $\zeta_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ gebruikt worden zoals besproken in hoofdstuk 2. In de zadelpuntsberekening wordt samen met $\mu_{sp}(\omega_\uparrow, \omega_\downarrow)$ ook de bandkloof $\Delta_{sp}(\omega_\uparrow, \omega_\downarrow)$ gevonden. Een tweede vereiste benadering bestaat eruit om in alle coëfficiënten behalve Ω de totale golffunctie te benaderen als:

$$\Psi(\mathbf{r}) \rightarrow \Delta_{sp}. \quad (4.12)$$

Dit is geen slechte benadering in de E en C coëfficiënten omdat deze al tweede orde bijdragen zijn en de fluctuaties die niet meegenomen worden allemaal van derde orde of hoger zijn. In de eerste orde rotatiecoëfficiënten D en U mist deze benadering alle tweede orde rotatie effecten. De initiële EFT afleiding nam echter rotatie slechts tot op eerste orde mee en daardoor is de benadering (4.12) consistent in deze context. Voor een cilindrische container met straal R is de effectieve vrije energie per hoek per hoogte gelijk aan:

$$F_{\text{eff}} = \int_0^R dr r \left[\Omega_s(w) - \Omega_s(|\Psi_\infty|^2) + C|\Psi_\infty|^2 \left[\left(\frac{\partial a(r)}{\partial r} \right)^2 + \frac{a(r)^2}{r^2} \right] - E|\Psi_\infty|^4 4a(r)^2 \left(\frac{\partial a(r)}{\partial r} \right)^2 + \right. \\ \left. - \frac{r}{2} [D(\omega_\uparrow + \omega_\downarrow) + U(\omega_\downarrow - \omega_\uparrow)] |\Psi_\infty|^2 \frac{a(r)^2}{r} \right]. \quad (4.13)$$

De functie $a(r) = \tanh\left(\frac{r}{R_v}\right)$ kan nu ingevuld worden:

$$F_{\text{eff}} = \int_0^R dr r \left[\Omega_s\left(\tanh^2\left(\frac{r}{R_v}\right)\right) - \Omega_s(|\Psi_\infty|^2) + C|\Psi_\infty|^2 \left[\frac{1}{R_v^2} \text{sech}^4\left(\frac{r}{R_v}\right) + \frac{1}{r^2} \tanh^2\left(\frac{r}{R_v}\right) \right] \right. \\ \left. - E \frac{4|\Psi_\infty|^4}{R_v^2} \tanh^2\left(\frac{r}{R_v}\right) \text{sech}^4\left(\frac{r}{R_v}\right) - \frac{1}{2} [D(\omega_\uparrow + \omega_\downarrow) + U(\omega_\downarrow - \omega_\uparrow)] |\Psi_\infty|^2 \tanh^2\left(\frac{r}{R_v}\right) \right]. \quad (4.14)$$

Nu wordt de substitutie $r = r'R_v$ gemaakt wat de R_v afhankelijkheid naar de integratiegrenzen verplaatst:

$$F_{\text{eff}} = \int_0^{R/R_v} dr r \left[R_v^2 (\Omega_s(\tanh^2(r)) - \Omega_s(|\Psi_\infty|^2)) + C|\Psi_\infty|^2 \left[\text{sech}^4(r) + \frac{1}{r^2} \tanh^2(r) \right] \right. \\ \left. - 4 E|\Psi_\infty|^4 \tanh^2(r) \text{sech}^4(r) - \frac{R_v^2}{2} [D(\omega_\uparrow + \omega_\downarrow) + U(\omega_\downarrow - \omega_\uparrow)] |\Psi_\infty|^2 \tanh^2(r) \right]. \quad (4.15)$$

De afgeleide van (4.15) naar R_v wordt term per term berekend. De eerste term resulteert in:

$$2R_v \int_0^{R/R_v} dr r (\Omega_s(\tanh^2(r)) - \Omega_s(|\Psi_\infty|^2)) - \frac{R^2}{R_v} \left(\Omega_s\left(\tanh^2\left(\frac{R}{R_v}\right)\right) - \Omega_s(|\Psi_\infty|^2) \right). \quad (4.16)$$

Het kan worden aangetoond dat voor grote R de factor $(\Omega_s(|\Psi(R/R_v)|^2) - \Omega_s(|\Psi_\infty|^2))$ sneller naar 0 gaat dan R^2 groeit en deze term dus verwaarloosbaar is voor een grote container. De afgeleide van de volgende term uit de vrije energie resulteert in:

$$\frac{R-R}{R_v} \frac{C|\Psi_\infty|^2}{R_v^2} \left[\text{sech}(R/R_v)^4 + \frac{\tanh(R/R_v)^2}{(R/R_v)^2} \right] = -\frac{1}{R_v} C|\Psi_\infty|^2. \quad (4.17)$$

De laatste stap geldt voor grote R/R_v omdat de hyperbolische secant veel sneller naar nul gaat dan de voorfactor R^2 groeit en omdat voor grote R/R_v de hyperbolische tangens door 1 benaderd kan worden. Hetzelfde argument kan gebruikt worden om aan te tonen dat de term met de factor E geen bijdrage levert. Uiteindelijk wordt de afgeleide van de termen in D en U :

$$\frac{R_v^2}{2} \frac{R}{R_v} \frac{R}{R_v^2} [D(\omega_\uparrow + \omega_\downarrow) + U(\omega_\downarrow - \omega_\uparrow)] |\Psi_\infty|^2 \tanh(R/R_v)^2 \\ - R_v |\Psi_\infty|^2 \int_0^{R/R_v} dr r [D(\omega_\uparrow + \omega_\downarrow) + U(\omega_\downarrow - \omega_\uparrow)] \tanh(r)^2. \quad (4.18)$$

De integraal in de tweede term kan analytisch uitgerekend worden:

$$\int dr r \tanh(r)^2 = \frac{r^2}{2} - r \tanh(r) + \log(\cosh(r)). \quad (4.19)$$

Dit wordt gesubstitueerd in (4.18):

$$\begin{aligned} & [D(\omega_\uparrow + \omega_\downarrow) + U(\omega_\downarrow - \omega_\uparrow)] |\Psi_\infty|^2 \left(\frac{R^2}{2R_v} \tanh(R/R_v)^2 - \frac{1}{2} R_v \frac{R^2}{R_v^2} + R_v \frac{R}{R_v} \tanh(R/R_v), \right. \\ & \quad \left. - R_v \log(\cosh(R/R_v)) \right) \\ &= [D(\omega_\uparrow + \omega_\downarrow) + U(\omega_\downarrow - \omega_\uparrow)] |\Psi_\infty|^2 \left(\frac{R^2}{2R_v} - \frac{1}{2} \frac{R^2}{R_v} + R_v \log(2) \right) \\ &= [D(\omega_\uparrow + \omega_\downarrow) + U(\omega_\downarrow - \omega_\uparrow)] |\Psi_\infty|^2 R_v \log(2). \end{aligned} \quad (4.20)$$

Alle berekende termen leveren samen een vergelijking op voor R_v :

$$2R_v^2 \int_0^{R/R_v} dr r (\Omega_s(\tanh(r)) - \Omega_s(|\Psi_\infty|^2)) - \frac{1}{R_v} C |\Psi_\infty|^2 + [D(\omega_\uparrow + \omega_\downarrow) + U(\omega_\downarrow - \omega_\uparrow)] |\Psi_\infty|^2 R_v \log(2) = 0. \quad (4.21)$$

Dit kan wat herschreven worden:

$$R_v^2 \left[2 \int_0^{R/R_v} dr r (\Omega_s(w) - \Omega_s(|\Psi_\infty|^2)) + [D(\omega_\uparrow + \omega_\downarrow) + U(\omega_\downarrow - \omega_\uparrow)] |\Psi_\infty|^2 \log(2) \right] - C |\Psi_\infty|^2 = 0. \quad (4.22)$$

De vortex straal R_v is dan:

$$R_v = \sqrt{\frac{C |\Psi_\infty|^2}{2 \int_0^{R/R_v} dr r (\Omega_s(w) - \Omega_s(|\Psi_\infty|^2)) + [D(\omega_\uparrow + \omega_\downarrow) + U(\omega_\downarrow - \omega_\uparrow)] |\Psi_\infty|^2 \log(2)}}. \quad (4.23)$$

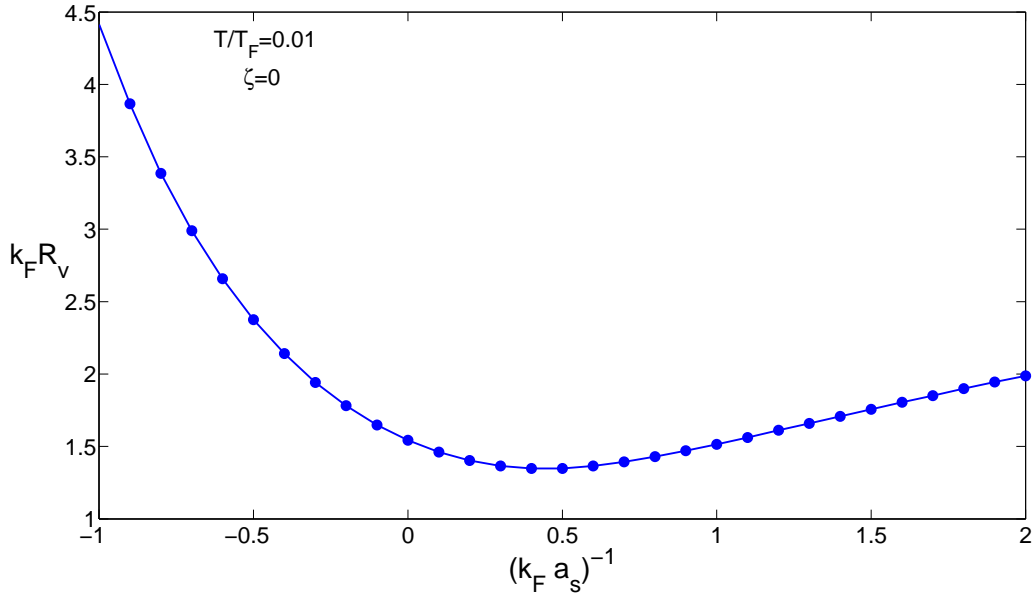
De integraal in de noemer convergeert zeer snel en voor $R \gg R_v$:

$$R_v = \sqrt{\frac{C |\Psi_\infty|^2}{2 \int_0^\infty dr r (\Omega_s(w) - \Omega_s(|\Psi_\infty|^2)) + [D(\omega_\uparrow + \omega_\downarrow) + U(\omega_\downarrow - \omega_\uparrow)] |\Psi_\infty|^2 \log(2)}}. \quad (4.24)$$

Indien hier de andere conventie $R_v \rightarrow \sqrt{2}R_v$ gebruikt wordt, reduceert deze uitdrukking voor $\omega = 0$ tot de variationele uitdrukking van de vortex straal in [44]. In figuur (17) wordt uitdrukking (4.24) op een andere schaal $R_v = \sqrt{2}R_v$ voor $\omega = 0$ als functie van $(k_F a_s)^{-1}$ geplot. Dit komt exact overeen met de grafiek in [44] en is een goede consistentie test. Natuurlijk is de $\omega_\uparrow - \omega_\downarrow$ -bijdrage nieuw aan uitdrukking (4.24) en wordt deze nu in meer detail bestudeerd.

4.2.2 Resultaten rotatie beide componenten

In figuren (18), (19) en (20) wordt de grootte van de vortexkern R_v als functie van ω voor de rotatie van beide componenten $\omega = \omega_\uparrow = \omega_\downarrow$ geplot. De inverse verstrooiingslengte werd hier dicht bij de crossover gekozen $(k_F a_s)^{-1} = 0.5, 0.25$ en 0 . De straal van de container is $k_F R = 5$ en de temperatuur

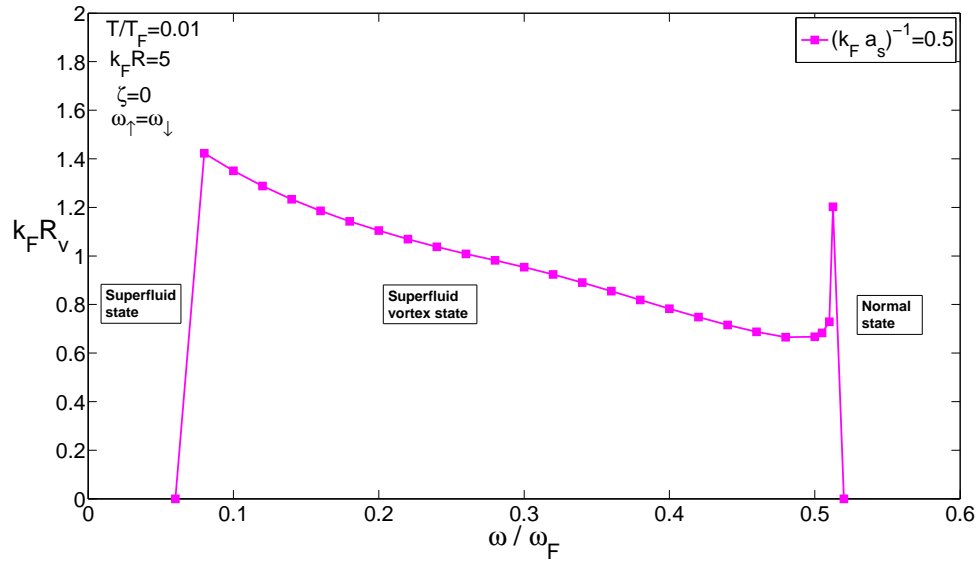


Figuur 17: De vortex straal in andere conventie $R_v = R_v \sqrt{2}$ op $\omega = 0$ als functie van $(k_F a_s)^{-1}$.

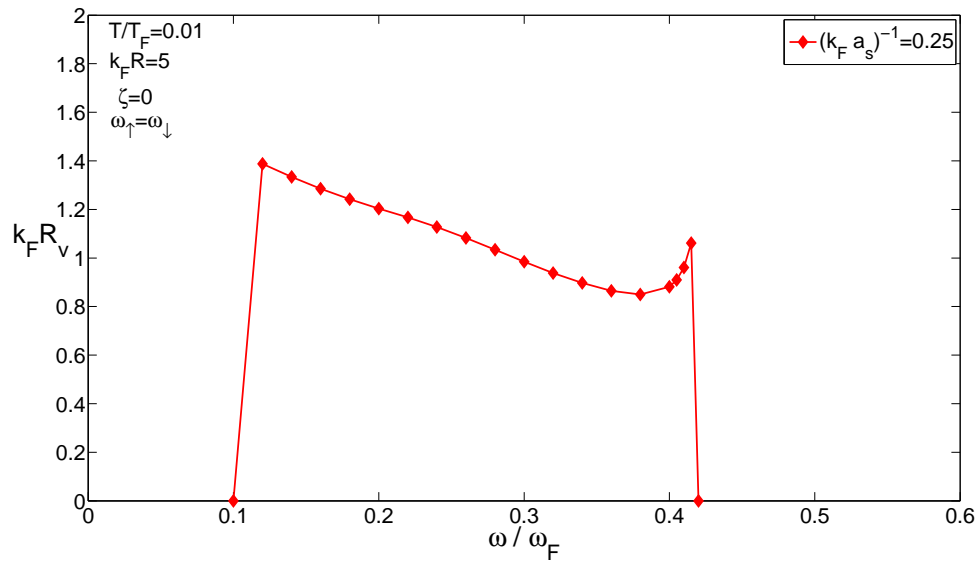
$T = 0.01T_F$. Er is geen externe spin-onbalans geïntroduceerd $\zeta_0 = 0$. De eerste kritische frequentie waarop de vortex ontstaat wordt gegeven door de waarde waarop $F_e < 0$ wordt. Voor frequenties lager dan deze onderste kritische frequentie bevindt het condensaat zich in een superfluïde toestand zonder vortices. De tweede kritische frequentie waarop de vortex verdwijnt kan twee oorzaken hebben. Voor figuur (18) levert op de bovenste kritische frequentie de zadelpuntsbenadering geen oplossingen meer voor Δ_{sp} wat betekent dat het condensaat rechtsreeks in de normale toestand overgaat. Voor figuren (19) en (20) dichter bij unitariteit wordt op de tweede kritische frequentie $F_e > 0$ en gaat de vortex dus eerst over in een superfluïde niet-vortex toestand waarna het vervalst. Dit gebeurt allemaal zeer kort na elkaar op de frequentie-as waardoor een studie van dit effect met grote nauwkeurigheid zou moeten gebeuren. In dit werk zal verder de focus meer op de algemene vortexstructuren en de componentsgewijze rotatie gelegd worden. De figuren tonen aan dat de eerste kritische frequentie groter wordt naarmate je van de BEC kant van de unitariteit naar de BCS kant overgaat. De twee kritische frequentie wordt hierbij juist kleiner. Dit betekent dat vortices minder stabiel zijn in het unitariteitsregime en duidelijk een kleiner bestaansgebied hebben in figuur (20). De plotse stijging in de grootte van de vortexkern net voor de tweede kritische frequentie in figuren (18) en (19) is kenmerkend voor een overgang in een normale toestand. Hierbij begint de bindingsenergie Δ zeer snel te dalen wat de coherentielengte doet stijgen.

4.2.3 Resultaten rotatie van één component

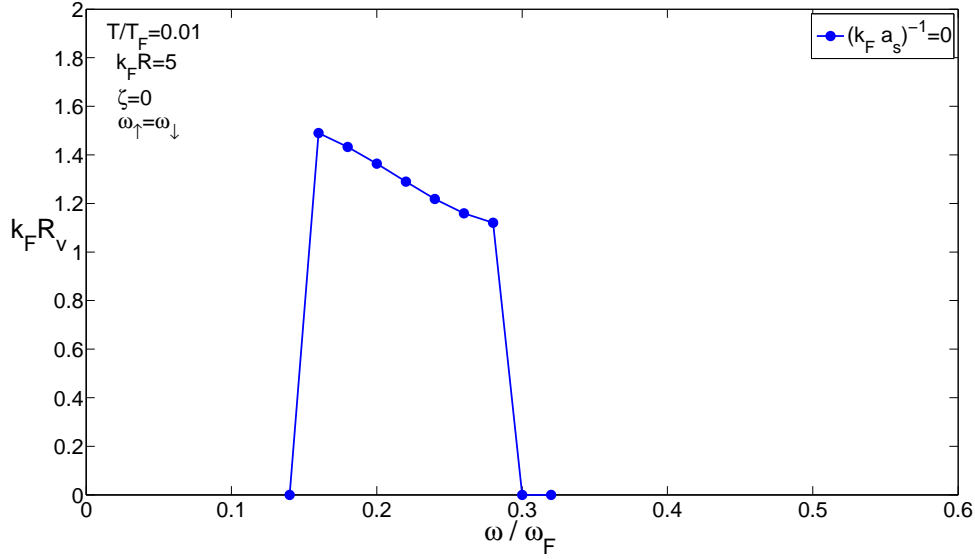
Vervolgens wordt de vortex beschouwd voor de rotatie van een enkele component $\omega_\uparrow = \omega$ en $\omega_\downarrow = 0$. Omdat de vortexkern hier groter zal blijken te zijn, wordt de straal van de container ook groter gemaakt naar $k_F R = 15$ om te voldoen aan $R \gg R_v$. De inverse verstrooiingslengte is nog steeds in het unitariteitsregime $(k_F a_s)^{-1} = 0.5$ en de temperatuur is $T = 0.01T_F$. In figuur (21) wordt dit weergegeven, terwijl daaronder in figuur (22) dezelfde situatie voor een rotatie van beide componenten ter vergelijking weergegeven wordt. Het is onmiddellijk duidelijk dat de grootte van de vortexkern voor de rotatie van een enkele component zich significant anders gedraagt. Het meest opvallende is de kloof in figuur (21). Hier wisselt de noemer in (4.24) van teken wat natuurlijk gepaard gaat met twee



Figuur 18: Vortex straal R_v als functie van de frequentie voor een rotatie van beide componenten voor $(k_F a_s)^{-1} = 0.5$.

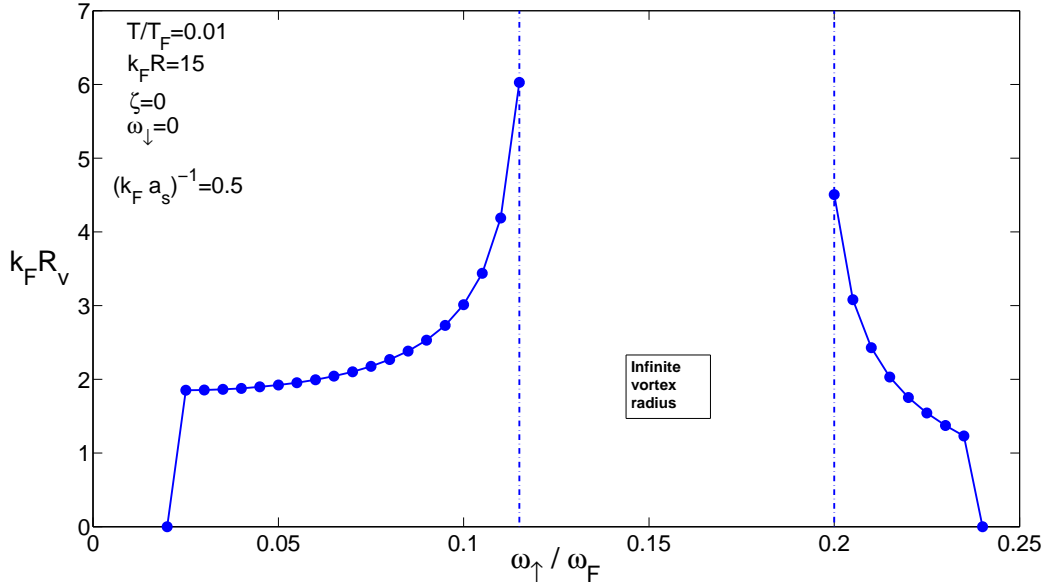


Figuur 19: Vortex straal R_v als functie van de frequentie voor een rotatie van beide componenten voor $(k_F a_s)^{-1} = 0.25$.

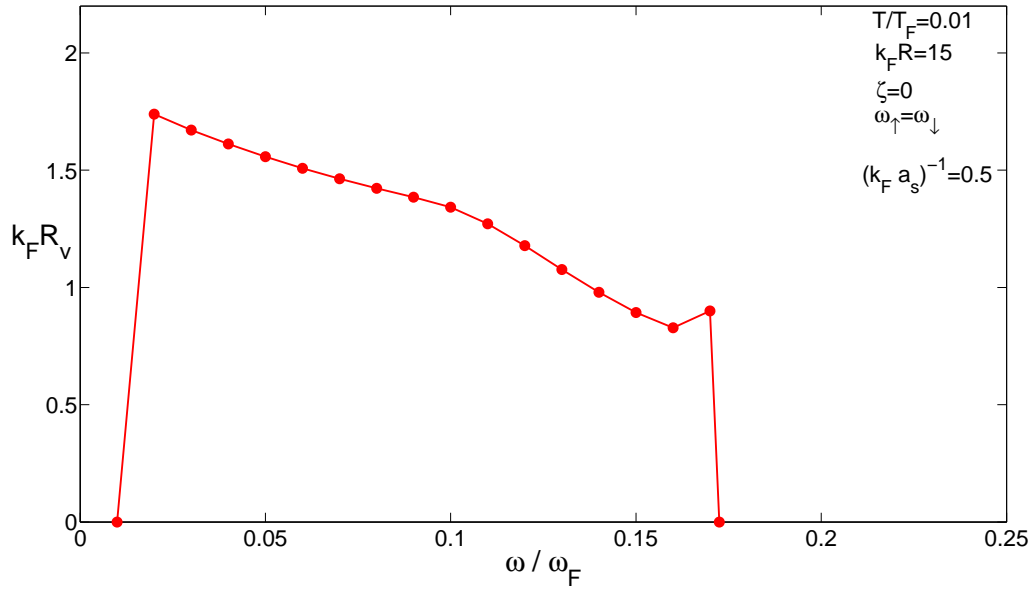


Figuur 20: Vortex straal R_v als functie van de frequentie voor een rotatie van beide componenten voor $(k_F a_s)^{-1} = 0$.

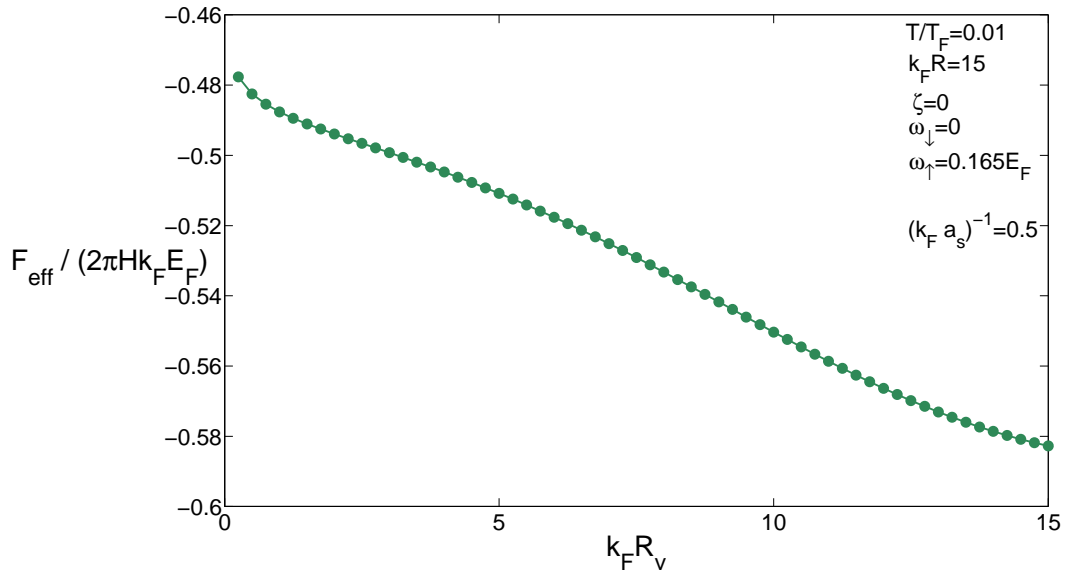
divergenties. In deze kloof is het energetisch voordelig om de vortex zo groot mogelijk te maken. Dit kan gezien worden in figuur (23) waarbij een plot van de vrije energie F_e weergegeven wordt als functie van R_v voor de parameters μ_{sp} en Δ_{sp} op een vaste frequentie in de kloof. Verder is de vortexkern dus groter dan in (22) en verschijnt de vortex op hogere frequenties, maar blijft wel langer bestaan. Deze onverwachte stabiliteit is reeds aangehaald geweest in de bespreking van de resultaten van hoofdstuk 2 en wordt in de discussie op het einde nog verder besproken. Figures (24) en (25) geven de zadelpuntswaarden Δ_{sp} en μ_{sp} voor respectievelijk de grafieken (21) en (22). De kloof in figuur (21) is het gevolg van een niet-genormaliseerde variationele functie en zal in de volgende subsectie in rekening gebracht worden.



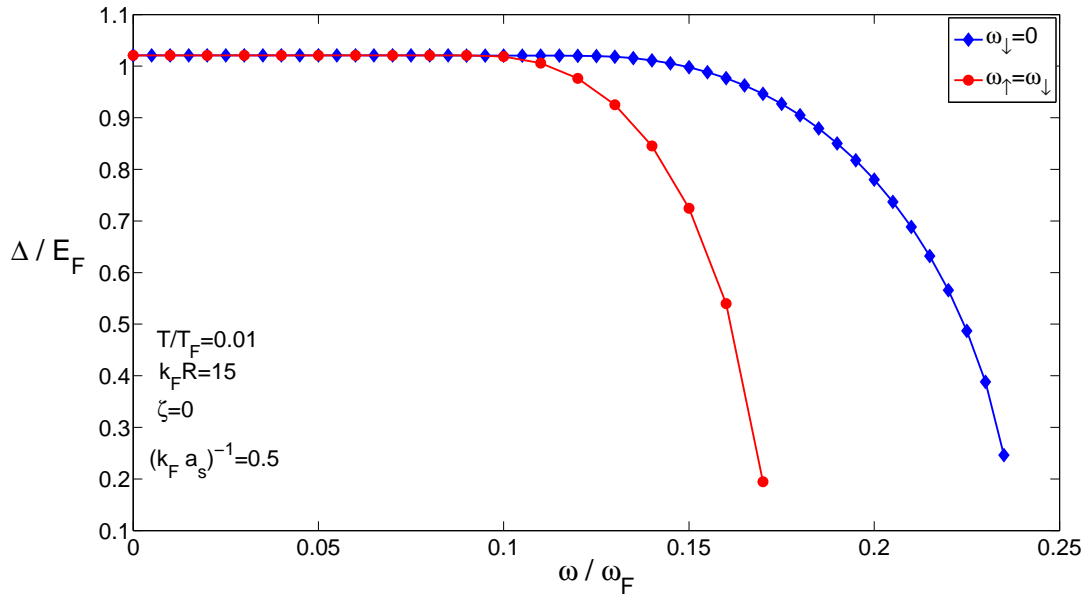
Figuur 21: Vortex straal R_v als functie van de frequentie voor ééncomponentrotatie op $(k_F a_s)^{-1} = 0.5$.



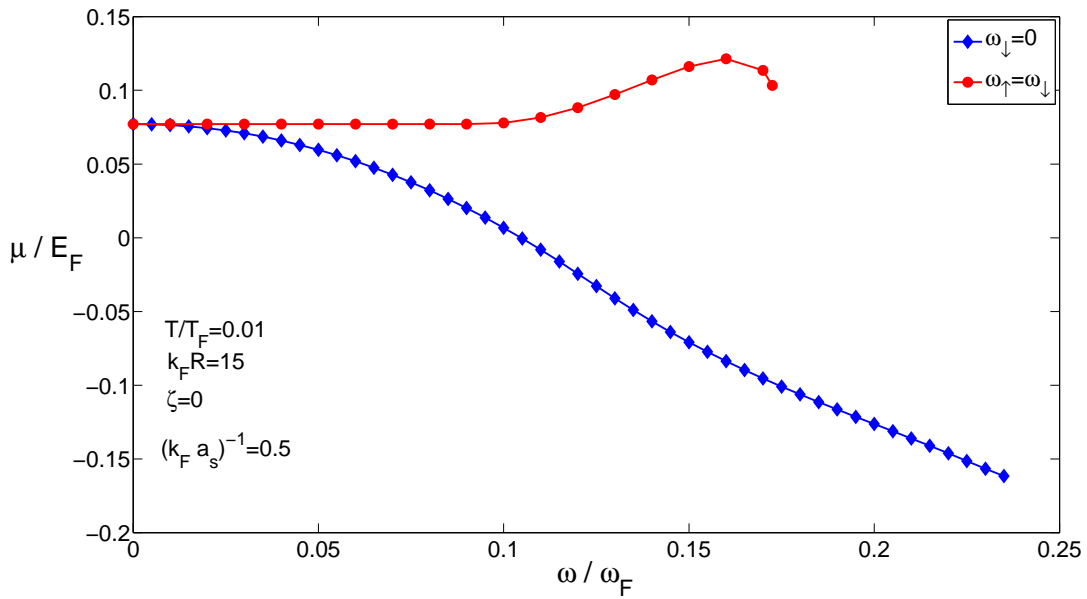
Figuur 22: Vortex straal R_v als functie van de frequentie voor een rotatie van beide componenten voor $(k_F a_s)^{-1} = 0.5$.



Figuur 23: De effectieve vrije energie per hoogte per hoek als functie van de variationele parameter R_v in de vortexloze regio van figuur (21). Dit is een aanwijzing dat een genormaliseerde golf functie gebruikt zal moeten worden.



Figuur 24: De bulkwaarden Δ_{sp} als functie van de frequentie voor de vortices uit (22) en (23)



Figuur 25: De globale waarden μ_{sp} als functie van de frequentie voor de vortices uit (22) en (23)

4.3 De variationele golffunctie normaliseren

Het probleem bij ééncomponentsrotatie in de vorige sectie is dat de variationele functie $\Psi = \Delta_{sp} \tanh(r/R_v)$ gebruikt werd zonder de normalisatie in rekening te brengen. De vortex straal kon dus zo groot als de container worden zonder een prijs te moeten betalen aan toename in dichtheid aan de randen. Er zou gewoonweg gesteld kunnen worden dat de golffunctie nu:

$$\Psi \rightarrow \frac{\Psi}{\sqrt{\int |\Psi|^2 dV}} \quad (4.25)$$

moet worden. Uiteindelijk zal dit inderdaad het resultaat zijn, maar het is interessant om dit wat meer te staven in de context van de EFT. Verdergaand in deze benadering met constante coëfficiënten wordt de dichtheid van het superfluidum gegeven door [45]:

$$\rho_{sf}(\mathbf{r}) = 2C_{sp}|\Psi(\mathbf{r})|^2, \quad (4.26)$$

waarbij C_{sp} verwijst naar het gebruik $\mu_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \mu_{sp}$, $\Psi(\mathbf{r}) = \Delta_{sp}$, $\zeta_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \zeta_{sp}$ hierin. De exacte uitdrukking voor de superfluïde-dichtheid in de zadelpuntsbenadering wordt gegeven door:

$$\rho_{sf}^{(sp)} = 2C_{sp}\Delta_{sp}^2. \quad (4.27)$$

Binnen de benadering waarin de vortex slechts een perturbatie is in een homogeen condensaat zou behoud van deeltjes eisen dat:

$$\int \rho_{sf}(\mathbf{r})dV = \int \rho_{sf}^{(sp)}dV = 2C_{sp}\Delta_{sp}^2V. \quad (4.28)$$

Merk hierbij op dat dit niet impliceert dat het aantal deeltjes in de superfluïde fase niet verandert naarmate de rotatie toeneemt. Dit effect zit volledig in Δ_{sp} die een rotatie-afhankelijke parameter is die berekend wordt in de zadelpuntsbenadering. Uitdrukking (4.28) stelt gewoonweg dat de variationele toets zelf het aantal deeltjes moet behouden. De nieuwe variationele ansatz:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{\Delta_{sp}\sqrt{V}}{\sqrt{\int \tanh^2(r/R_v)dV}} \tanh\left(\frac{r}{R_v}\right) \quad (4.29)$$

voldoet aan (4.28). Na de substitutie $r' = rR_v$ in de integraal en het uitintegreren van de angulaire en verticale cilindrische coördinaten wordt de functie:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{\Delta_{sp}\sqrt{V}}{\sqrt{2\pi HR_v^2 \int_0^{R/R_v} r \tanh^2(r) dr}} \tanh\left(\frac{r}{R_v}\right). \quad (4.30)$$

Deze integraal heeft een reeds aangehaalde analytische uitdrukking:

$$\int_0^{R/R_v} r \tanh^2(r) dr = \frac{R^2}{2R_v^2} - \frac{R}{R_v} \tanh\left(\frac{R}{R_v}\right) + \log\left(\cosh\left(\frac{R}{R_v}\right)\right). \quad (4.31)$$

De variationele functie wordt dan:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{\Delta_{sp}\sqrt{V}}{\sqrt{2\pi HR_v^2 \left[\frac{R^2}{2R_v^2} - \frac{R}{R_v} \tanh\left(\frac{R}{R_v}\right) + \log\left(\cosh\left(\frac{R}{R_v}\right)\right) \right]}} \tanh\left(\frac{r}{R_v}\right), \quad (4.32)$$

en kan uiteindelijk herschreven worden naar:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{\Delta_{sp}}{\sqrt{1 - 2\frac{R_v}{R} \tanh\left(\frac{R}{R_v}\right) + 2\frac{R_v^2}{R^2} \log\left(\cosh\left(\frac{R}{R_v}\right)\right)}} \tanh\left(\frac{r}{R_v}\right). \quad (4.33)$$

Het is eenvoudig om na te gaan dat (4.33) inderdaad genormaliseerd is voor radiële integratie $\int |\Psi|^2 r dr$.

4.4 Numerieke minimalisatie van de vrije energie

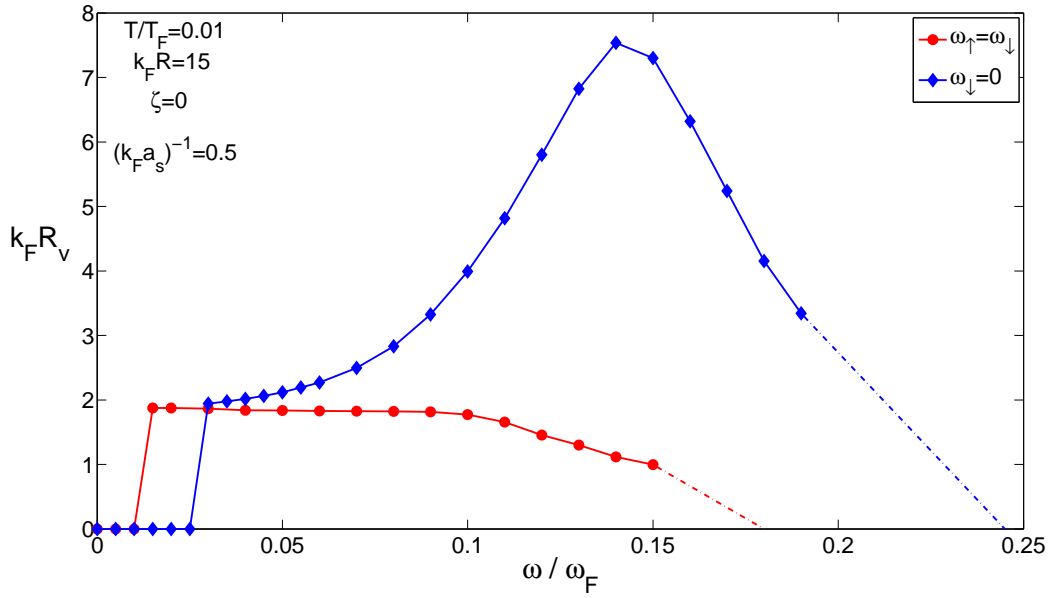
4.4.1 De straal van de vortexkern

De eerste optie is om een eerste orde expansie van de normalisatiefactor in (4.33) te doen. Dit zou mits bijkomende benaderingen nog steeds een gesloten uitdrukking voor R_v kunnen opleveren. Dit werd nagegaan en loste de kloof in figuur (21) niet volledig op. De reden hiervoor is dat de computationele tijd erg hard toeneemt om de zadelpuntswaarden Δ_{sp} en μ_{sp} te berekenen voor een groter wordende straal en kan R dus slechts enkele malen groter genomen worden dan R_v . Het is dus belangrijk om de volledige normalisatiefactor mee te nemen. In dit geval moet de minimalisatie van de vrije energie numeriek gebeuren. Natuurlijk zijn in dit geval alle benaderingen van de vorige sectie niet nodig en kan de exacte variationele vrije energie geminimaliseerd worden. De enige benadering die wel gemaakt kan worden is om de coëfficiënten C en E nog steeds in de benadering $\mu_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \mu_{sp}$, $\zeta_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \zeta_{sp}$ en $\Psi(\mathbf{r}) = \Delta_{sp}$ te evalueren. Dit bevordert de computationele tijd en beïnvloedt de algemene resultaten niet sterk.

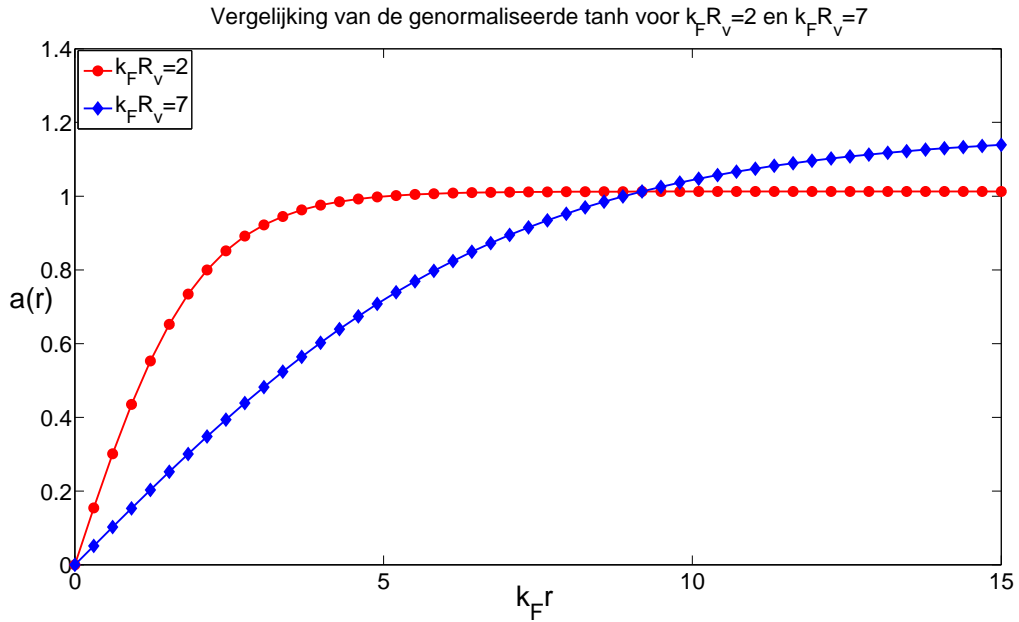
De resultaten worden weergegeven in figuur (26) voor de rotatie van beide componenten en de rotatie van één component voor een container van straal $k_F R = 15$, een temperatuur $T = 0.01 T_F$ en interactieparameter $(k_F a_s)^{-1} = 0.5$. Het punt waarop op de grafiek R_v naar nul gaat, werd bekomen door de frequentie te bepalen waar de zadelpuntsbenadering geen stabiele superfluïde toestand meer oplevert. Het is belangrijk om op te merken dat net als in figuren (18) en (19) het te verwachten is dat de vortexkern vooraleer te verdwijnen nog zal beginnen uitzetten ten gevolge van een dalende Δ . De huidige implementatie van de numerieke minimalisatie bleek hier niet numeriek stabiel voor. De kloof uit de vorige sectie wordt dus gesloten door de normalisatie mee te nemen. De vortex straal bij de rotatie van één component is opvallend veel groter en vertoont een piek.

De gebruikte variationele functie is een genormaliseerde hyperbolische tangens. Het is dus niet zo dat er op de piek in figuur (26) een gebied met straal $k_F R = 8$ zonder condensaat is. De normalisering zorgt ook voor een verandering in de betekenis van de parameter R_v . Een waarde van bv. $R_v = 35$ stelt een vortex voor die slechts enkele keren groter is dan de vortex voor $R_v = 2$. In figuur (27) wordt dit voor $R_v = 2$ en $R_v = 7$ visueel weergegeven. Een betere manier om de grootte van de vortexkern van de genormaliseerde hyperbolische tangens weer te geven is om de vergelijking $N(r, Q_v) \tanh(r/Q_v) = \tanh(1)$ op te lossen naar Q_v . Dit wordt gedaan wordt in figuur (28).

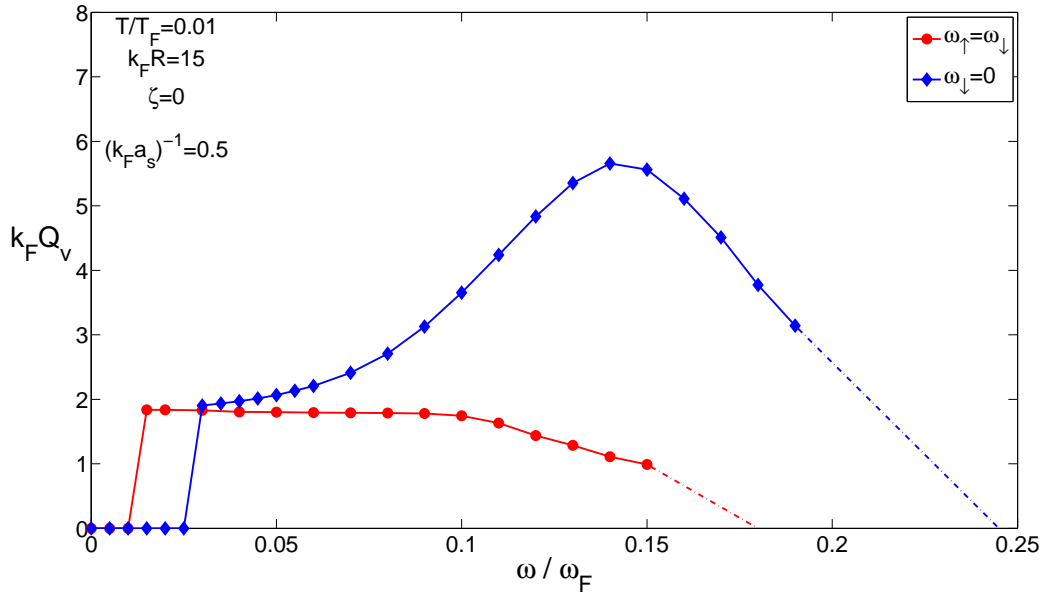
Om zeker te zijn van de nauwkeurigheid van de benaderingen $\mu_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \mu_{sp}$, $\zeta_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \zeta_{sp}$ en $\Psi(\mathbf{r}) = \Delta_{sp}$ in de coëfficiënten C en E wordt dit nog nagegaan in figuren (29) en (30). De waarden verschillen lichtjes maar het kwalitatief gedrag blijft identiek. Dit wijst erop dat binnen de context van de doelstellingen van dit werk dit zeker een goede benadering is.



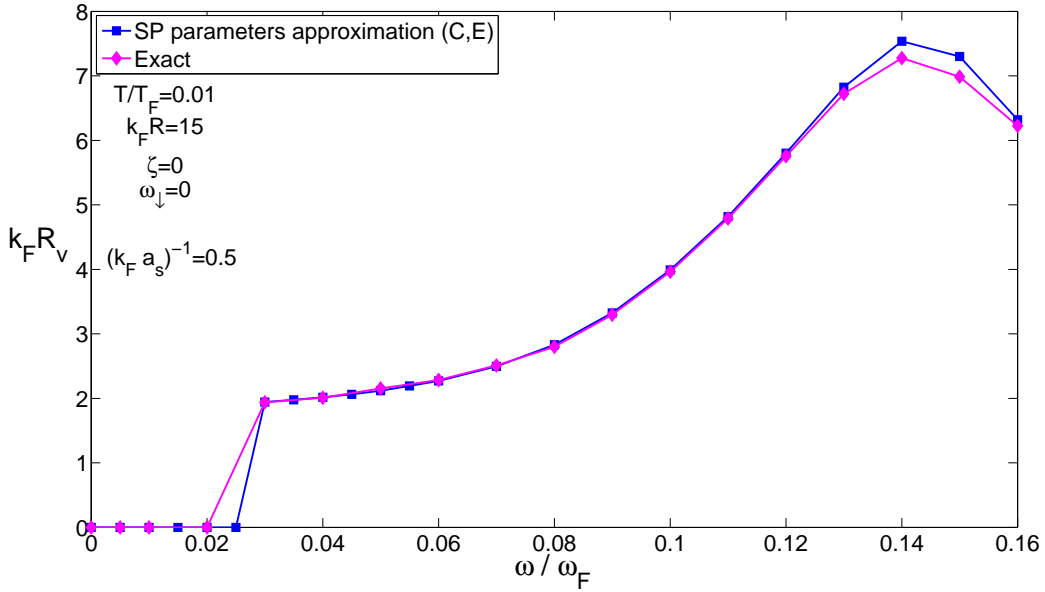
Figuur 26: De vortex straal voor $\omega_{\uparrow} = \omega_{\downarrow}$ en $\omega_d = 0$ voor een interactieparameter $(k_F a_s)^{-1} = 0.5$.



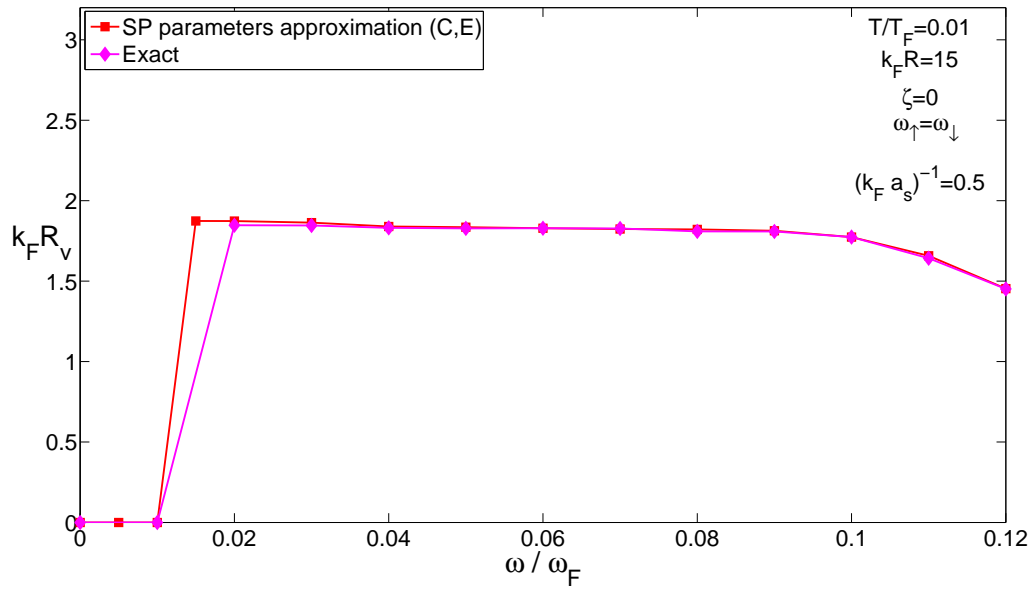
Figuur 27: Een visuele representatie van de genormaliseerde hyperbolische tangens voor $R_v = 2$ en $R_v = 7$.



Figuur 28: De genormaliseerde vortex straal Q_v voor $\omega_{\uparrow} = \omega_{\downarrow}$ en $\omega_{\downarrow} = 0$ voor een interactieparameter $(k_F a_s)^{-1} = 0.5$.



Figuur 29: Een vergelijking tussen de exacte oplossingen en van de benaderde C, E coëfficiënten voor vortices bij rotatie met $\omega_{\downarrow} = 0$.



Figuur 30: Een vergelijking tussen de exacte oplossingen en van de benaderde C, E coëfficiënten voor vortices bij rotatie met $\omega_{\downarrow} = \omega_{\uparrow}$.

5 Discussie

De discussie zal uit drie hoofdpunten bestaan. Eerst zal er besproken worden waarom superfluiditeit tot hogere rotatiefrequenties bij ééncomponentenrotatie kan blijven bestaan. Dit is te zien aan de resultaten in hoofdstuk 4 voor Δ_{sp} als functie van ω . Ook in hoofdstuk 2 werd dit reeds aangehaald. Het tweede deel van de discussie zal nadruk leggen op het verschillende gedrag van de grootte van de vortexkern bij de rotatie van enkel één component ten opzichte van gewone rotatie. Terwijl op lage rotatiefrequenties de vortexgrootte voor gewone rotatie niet sterk verandert als functie van toenemende frequentie begint deze voor ééncomponentenrotatie onmiddellijk te groeien. Uiteindelijk wordt er afgesloten met een omzetting van enkele gevonden grootheden naar SI eenheden met behulp van experimentele parameters om een beeld te geven van de schaal van de resultaten.

5.1 Het effect van rotatie op de stabiliteit van de superfluïde toestand

In figuur (24) werd de zadelpuntsoplossing Δ_{sp} als functie van de frequentie voor beide typen van rotatie $\omega_\uparrow = \omega_\downarrow = \omega$ en $\omega_\uparrow = \omega$ met $\omega_\downarrow = 0$ geplot. Hierop is te zien dat voor de rotatie van beide componenten de bandkloof in energie Δ verdwijnt rond $\omega = 0.16\omega_F$ en voor ééncomponentenrotatie op $\omega = 0.24\omega_F$. Als er klassiek over de fermionische paren nagedacht wordt, kan dit enigszins verrassend zijn. De rotatie van enkel één component uit een paar zou deze immers moeten breken. Natuurlijk zijn fermionische paren geen klassieke objecten die bestaan uit twee vaste fermionen. Hierdoor is het niet nuttig om te spreken over het breken van een paar bij de rotatie van één component hiervan. De intuïtie dat ééncomponentenrotatie dus meer instabiliteit in de superfluïde toestand moet veroorzaken is niet zo vanzelfsprekend. Bovendien introduceert rotatie van enkel de helft van het condensaat ook half zo weinig extra interne kinetische energie per paar wat juist voordelig kan zijn voor de stabiliteit. Om deze instabiliteit in een kwantummechanische context te bespreken zal gekeken worden naar de spin-onbalans parameter. Het is illustratief om deze eerst zonder rotatie op $\omega = 0$ te bespreken. In dat geval bestaat er slechts een globale spin-onbalans parameter ζ die op de volgende manier aan het verschil in deeltjesdichtheid $\delta n_{sp} = n_\uparrow - n_\downarrow$ tussen de twee spincomponenten gerelateerd is:

$$\delta n_{sp} = -\frac{\partial \Omega(T, \mu, \zeta; \Delta)}{\partial \zeta}. \quad (5.1)$$

In de eenheden van $k_F = 1$ resulteert dit in:

$$\frac{1}{3\pi^2} \frac{\delta n_{sp}}{n_{sp}} = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty dk k^2 \frac{\sinh(\beta\zeta)}{\cosh(\beta E_{\mathbf{k}}) + \cosh(\beta\zeta)}. \quad (5.2)$$

Op $\zeta = 0$ is er dus geen deeltjesonbalans, op $\zeta > 0$ zijn er meer deeltjes in de opwaartse spincomponent en op $\zeta < 0$ zijn er meer deeltjes in de neerwaartse spincomponent. Bij rotatie verandert de onbalansparameter naar:

$$\zeta_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \zeta_0 + (\mathbf{A}_\uparrow + \mathbf{A}_\downarrow) \cdot \mathbf{k}. \quad (5.3)$$

Eerst kan $\mathbf{A}_\uparrow = \mathbf{A}_\downarrow$ gesteld worden om het geval voor normale rotatie te onderzoeken. In dat geval wordt de onbalansparameter:

$$\zeta_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \zeta_0 + 2\mathbf{A} \cdot \mathbf{k}. \quad (5.4)$$

Op het eerste zicht lijkt dit te impliceren dat rotatie een verschil in opwaartse en neerwaartse spin introduceert wat natuurlijk niet het geval is. Op een vaste positie \mathbf{r} is \mathbf{A} constant maar moet er nog steeds

over alle \mathbf{k} geïntegreerd worden, waardoor de positieve en negatieve bijdragen van $\mathbf{A} \cdot \mathbf{k}$ elkaar opheffen. Er is dus in de reële ruimte geen deeltjesonbalans. Om uitdrukking (5.4) correct te interpreteren moet opgemerkt worden dat de \mathbf{k} hierin de reciproke vector is die met de opwaartse spincomponent correspondeert nadat de Nambu-spinor transformatie plaatsgevonden heeft. De onbalans-parameter $\zeta_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ moet eigenlijk als een onderdrukking van paarvorming van de opwaartse spincomponent op \mathbf{k} met de neerwaartse spincomponent op $-\mathbf{k}$ bekeken worden. Wanneer $\zeta > 0$, is de onderdrukking van paarvorming er vanwege een tekort aan deeltjes met neerwaartse spin. Wanneer $\zeta < 0$, is de onderdrukking er wegens een tekort van deeltjes met opwaartse spin. Dit geeft een duidelijke interpretatie aan uitdrukking (5.4). Als paarvorming beschouwd wordt waarbij de opwaartse spincomponent een lokale impuls heeft langs de rotatierichting en $\mathbf{A} \cdot \mathbf{k} > 0$, is de paarvorming onderdrukt wegens een tekort aan deeltjes met een neerwaartse spin op tegengestelde impuls $-\mathbf{k}$. Als paarvorming beschouwd wordt voor een opwaartse spincomponent met een tegengestelde impuls aan de rotatie $\mathbf{A} \cdot \mathbf{k} < 0$, is paarvorming onderdrukt wegens een tekort aan opwaartse spincomponent. In beide gevallen zijn er te weinig deeltjes die een impuls hebben die tegengesteld is aan de rotatierichting $\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}$. Rotatie van beide componenten zorgt er dus voor dat er minder fermionische paren gevormd worden.

Wanneer in uitdrukking (5.3) voor ééncomponentenrotatie $\mathbf{A}_{\downarrow} = 0$ genomen wordt, halveert de sterkte van dit effect:

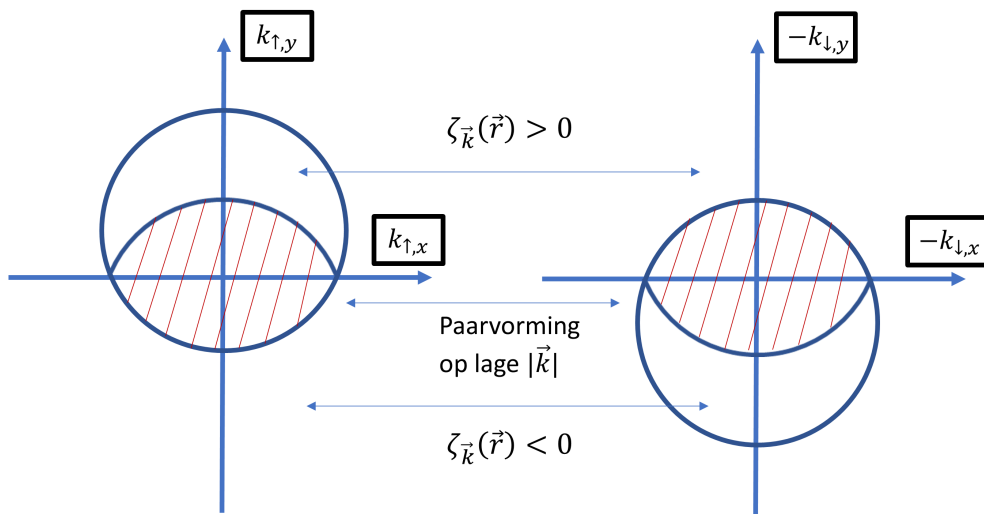
$$\zeta_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \zeta_0 + \mathbf{A}_{\uparrow} \cdot \mathbf{k}. \quad (5.5)$$

Voor normale rotatie heeft uitdrukking (5.4) hier bij de extra term een factor 2 meer staan. Hiermee is het duidelijk dat de onderdrukking van de fermionische paarvorming bij ééncomponentenrotatie half zo sterk is en de superfluïde toestand bijgevolg tot op hogere rotatiefrequenties moet bestaan. Een betere manier om hiervan de conclusie te formuleren is als volgt. De rotatie van één component zorgt wel degelijk voor een instabiliteit in de superfluïde fase, maar bij de rotatie van beide componenten is dit effect tweemaal zo sterk. Deze discussie neemt enkel $\zeta_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ in beschouwing wat genoeg blijkt te zijn voor de beoogde doelen van deze bespreking. Er is ook een verschil in de chemische potentiaal $\mu_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ voor beide typen van rotatie die verder in deze discussie aan bod zal komen.

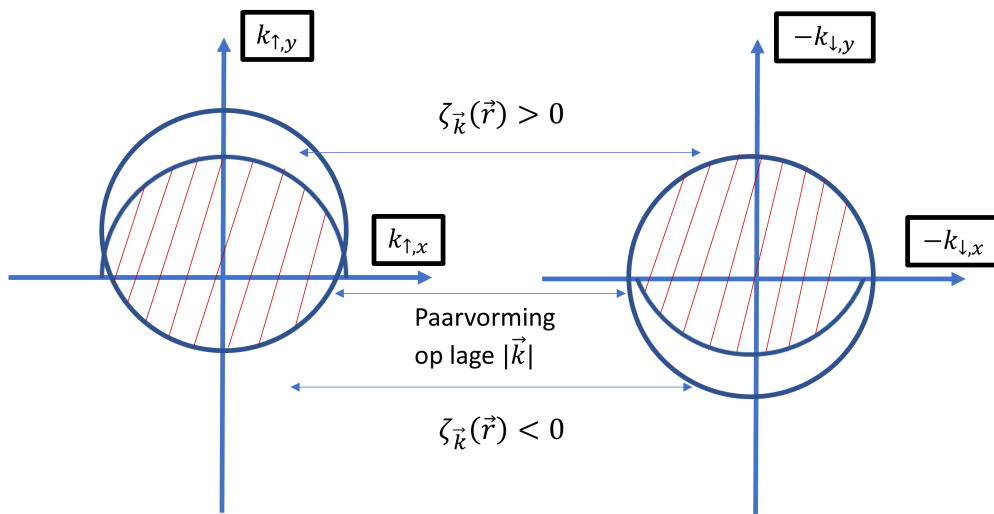
Dit gedrag kan ook begrepen worden op niveau van de Fermi sferen. Indien de opsluitingspotentiaal buiten beschouwing gelaten wordt, worden bij rotatie de chemische potentialen van de individuele spincomponent gegeven door:

$$\mu_{\mathbf{k},\sigma}(\mathbf{r}) = \mu_{\sigma} + 2\mathbf{A}_{\sigma} \cdot \mathbf{k}_{\sigma}. \quad (5.6)$$

De vectorpotentiaal \mathbf{A} ligt lokaal langs de richting van het snelheidsveld $\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}$ van de rotatie. In de LDA worden afzonderlijke volumes met elks daarin een vrij Fermi gas beschouwd waarin de deeltjes steeds afzonderlijke Fermi sferen hebben. Door met behulp van uitdrukking (5.6) de vergelijking $k^2 - \mu_{\sigma,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = 0$ op te lossen kunnen lokale effectieve Fermi sferen gevonden worden. Deze berekening wordt later in dit hoofdstuk in meer detail beschreven. In de laagste orde is het resultaat dat de Fermi sferen verschuiven in de richting van het rotatieveld en er ook een minimale vervorming van de cirkel plaatsvindt. De vervorming is echter niet relevant voor deze bespreking en wordt buiten beschouwing gelaten. Dit effect wordt kwalitatief weergegeven voor normale rotatie in figuur (31) en voor ééncomponentenrotatie in figuur (32). Hier is het effect van de voorheen besproken spin-onbalans $\zeta_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ duidelijk op te zien. Door de rotatie ontstaan er gebieden waar paarvorming onderdrukt is omdat er geen partnerdeeltjes met tegengestelde spin en impuls aanwezig zijn op de andere Fermi sfeer. Wanneer enkel één Fermi sfeer verschoven wordt bij ééncomponentenrotatie worden deze gebieden duidelijk kleiner.



Figuur 31: Een visualisatie van de Fermi sferen van de spincomponenten bij gezamenlijke rotatie van beide componenten. De Fermi sfeer voor de neerwaartse spin is afgebeeld als functie van $-\mathbf{k}_{\downarrow}$.



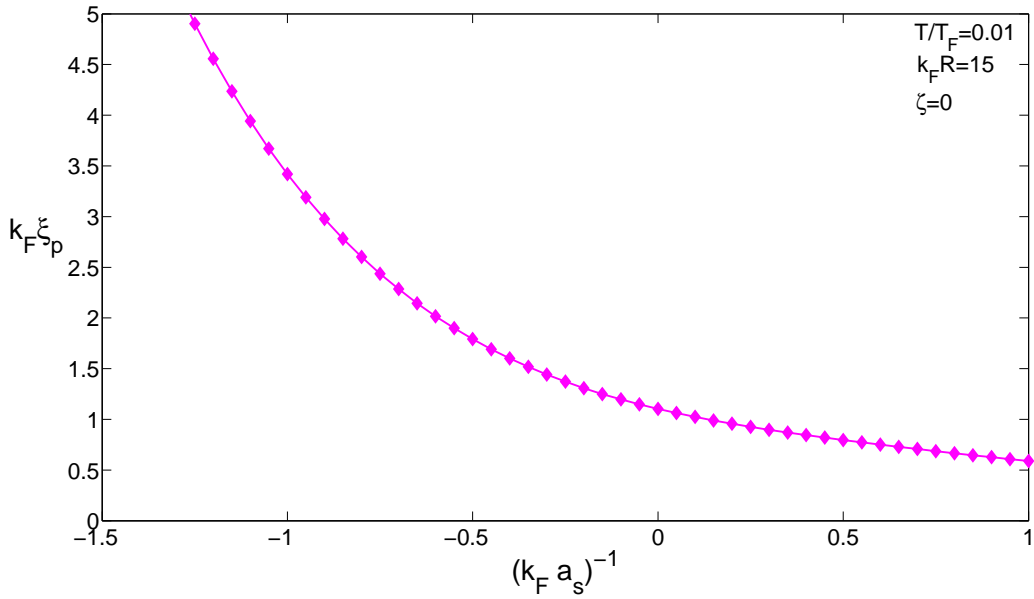
Figuur 32: Een visualisatie van de Fermi sferen van de spincomponenten bij ééncomponentrotatie. De Fermi sfeer voor de neerwaartse spin is afgebeeld als functie van $-\mathbf{k}_{\downarrow}$.

5.2 Analyse van de deeltjesdichtheid, paarcorrelatielengte en lokale Fermi sferen

In deze subsectie wordt het verschil in het gedrag van de grootte van de vortexkern R_v voor de twee typen van rotatie besproken. Een eerste interessante grootheid die in de context van deze discussie besproken kan worden is de paarcorrelatielengte. Deze lengte kan geïnterpreteerd worden als de typische grootte van een fermionisch paar. De uitdrukking voor de paarcorrelatielengte van een vrij Fermi gas in de EFT wordt afgeleid in [33]. Deze uitdrukking kan binnen de LDA redenering als een lokale paarcorrelatielengte gebruikt worden als de thermodynamische parameters in die uitdrukking door $\mu_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ en $\zeta_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ vervangen worden:

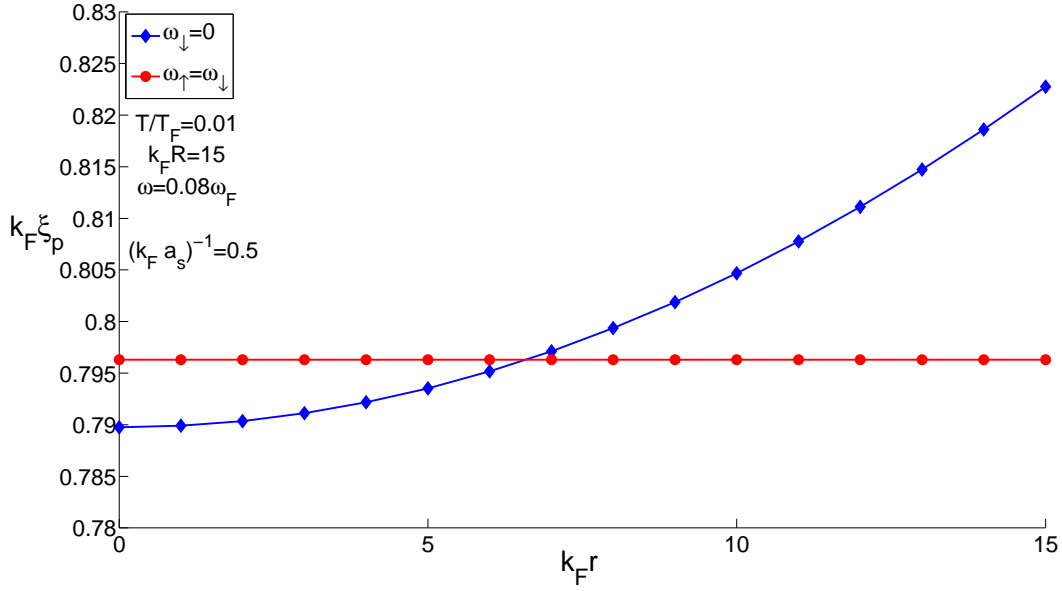
$$\xi_p(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{\int d\mathbf{k} k^2 [4\mathbf{k}\xi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})f_2(\beta, E_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \zeta_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}))]^2}{\int d\mathbf{k} k^2 [f_1(\beta, E_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \zeta_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}))]^2}}. \quad (5.7)$$

Als een test worden alle frequenties $\omega = 0$ gesteld en wordt deze uitdrukking als functie van de interactieparameter $(k_F a_s)^{-1}$ geplot in figuur (33) om de paarcorrelatielengte van een vrij Fermi gas terug te vinden net zoals in [33]. Door de frequenties nul te stellen verdwijnt bovendien de positieafhankelijkheid van de paarcorrelatielengte ξ_p .



Figuur 33: De paarcorrelatielengte voor een vrij Fermi gas als functie van de interactieparameter.

De volgende stap is om de rotatie nu mee te nemen en zo de paarcorrelatielengte van ééncomponentenrotatie en normale rotatie met elkaar als functie van de afstand tot de rotatie-as te vergelijken. Hiervoor wordt de correlatielengte beschouwd met een uniforme Δ afkomstig uit de respectievelijke zadelpuntoplossingen voor beide typen van rotatie. Op figuur (34) worden de resultaten weergegeven voor een frequentie $\omega = 0.08\omega_F$ waarop het verschil in vortexgrootte tussen de twee typen van rotatie in figuur (26) reeds merkbaar was. Het is onmiddellijk opvallend dat ξ_p voor ééncomponentenrotatie vergeleken met normale rotatie groter is ver van de rotatie-as en kleiner is dicht bij de rotatie-as. Dit betekent dat in de kern van de container de paren meer BEC-achtig worden terwijl naar de rand toe de paren meer BCS-achtig worden. Natuurlijk gebeurt dit in het unitariteitsregime met $(k_F a_s)^{-1} = 0.5$ en zijn BEC en BCS hier slechts relatieve termen.



Figuur 34: De paarcorrelatielengte op een vaste frequentie $\omega = 0.08\omega_F$ als functie van de afstand tot de rotatie-as voor een uniforme zadelpuntsoplossing Δ_{sp} en μ_{sp} voor de rotatie van respectievelijk één component en beide componenten.

De lokale fermiondichtheid in zadelpuntsbenadering kan ook geplot worden als functie van de afstand tot de rotatie-as op een frequentie van $\omega = 0.08\omega_F$ voor beide typen van rotatie. Met zadelpuntsbenadering wordt hier bedoeld dat enkel $\frac{\partial\Omega}{\partial\mu}$ in rekening genomen wordt. De dichtheid gevonden in deze beschouwing bevat effecten van de rotatie in nulde orde van de macroscopische golf functie $\Psi(\mathbf{r}) = \Delta$. Dit blijkt al voldoende te zijn om een niet-triviaal verschil te geven voor de dichtheid van beide typen van rotatie in figuur (35).

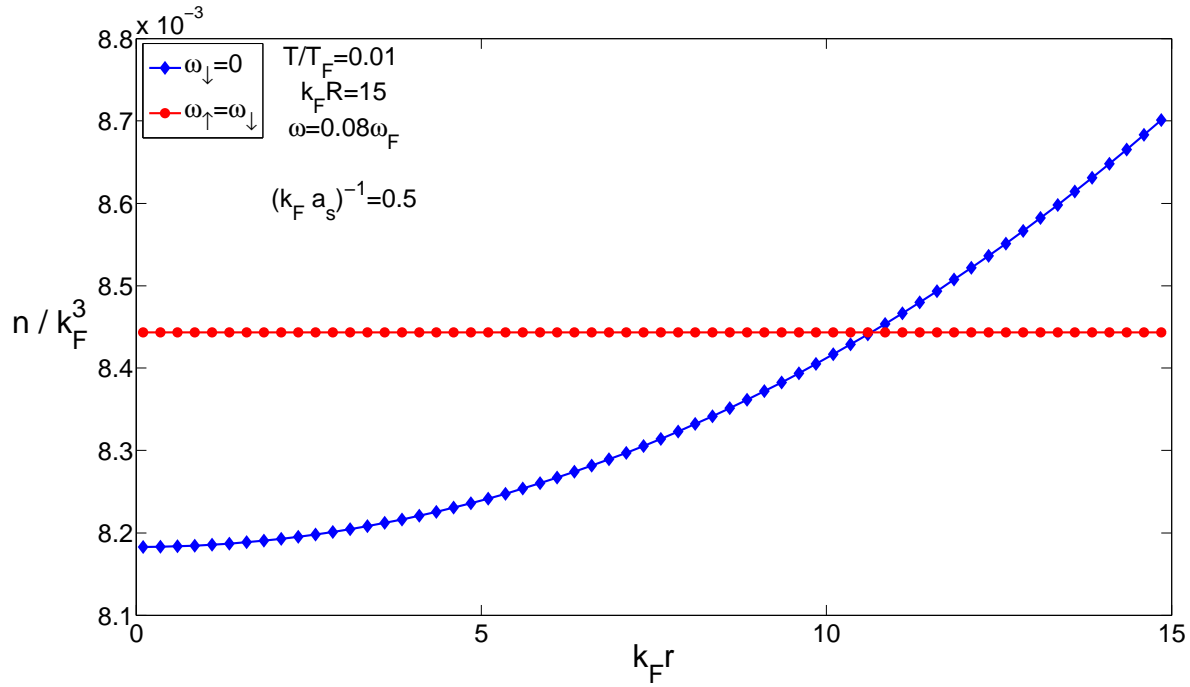
De aard van de fermionische paren kan ook op een andere manier onderzocht worden. In de huidige beschrijving worden de fermionische paren gevormd rond $\mathbf{k}_{tot} = 0$, zelfs wanneer rotatie aangezet wordt. Dit is omdat Ω de fermionische paren in nulde orde beschrijft wat ook consistent is met het zogenaamde Fairbank-Hess effect waarbij superfluïde condensaten enkel draaiimpuls toelaten in de vorm van vortices. De individuele fermionen in een paar hebben echter wel tegengestelde golfvectoren \mathbf{k} en $-\mathbf{k}$ die een magnitude hebben. Er zit dus interne kinetische energie in een fermionisch paar. Voor fermionen die paren vormen rond de chemische potentiaal kan deze interne kinetische energie die evenredig is met k^2 gevonden worden door:

$$k^2 - \frac{\mu_{\uparrow} + \mu_{\downarrow}}{2} = k^2 - \mu = 0, \quad (5.8)$$

naar de grootte van k op te lossen. In het geval van een vrij Fermi gas geeft de oplossing triviaal $k = \sqrt{\mu}$ of $k^2 = \mu$. Bij ééncomponentrotatie wordt $\mu \rightarrow \mu_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ waardoor de gemiddelde k van het fermionische paar op de chemische potentiaal gegeven wordt door de oplossingen van:

$$k^2 - \mu_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = k^2 - \mu_{sp} - \frac{1}{2}(\omega_{\uparrow} - \omega_{\downarrow})kr \cos(\theta) = 0. \quad (5.9)$$

De hoek θ staat hier voor de hoek die de vector van $-\mathbf{k}$ naar \mathbf{k} van het beschouwde paar maakt met het snelheidsveld van de rotatie op positie \mathbf{r} . Deze oplossingen worden voor twee tegengestelde oriëntaties

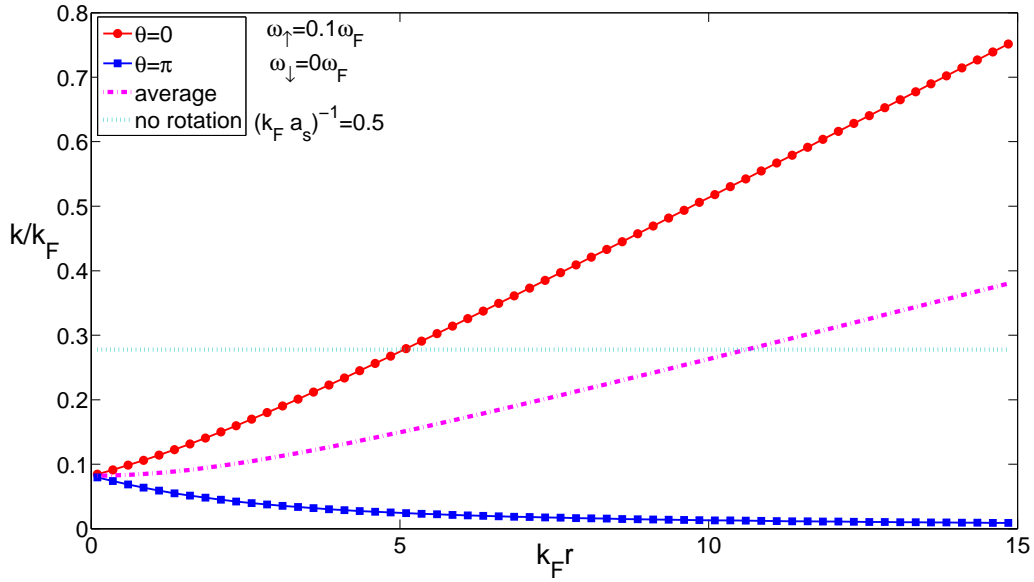


Figuur 35: De lokale deeltjesdichtheid voor ééncomponenten-en tweecomponentsrotatie als functie van de afstand tot de rotatie-as voor een rotatiefrequentie $\omega = 0.08\omega_F$.

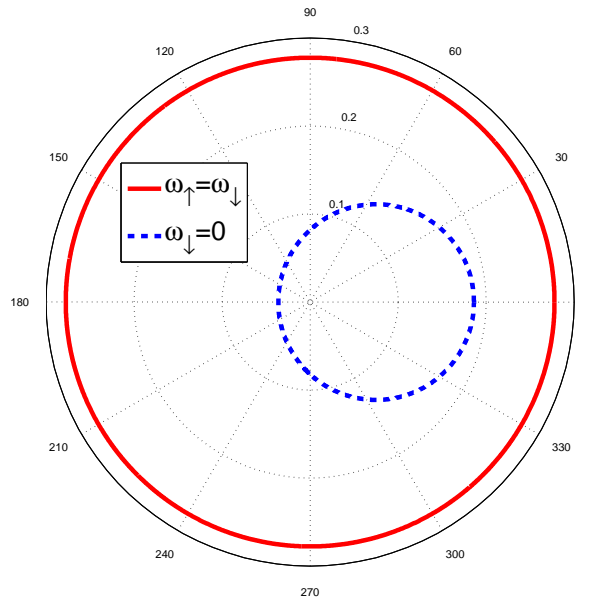
van θ weergegeven in figuur (36) voor een frequentie $\omega_\uparrow = 0.1\omega_F$ waarop het verschil in vortexgroottes op de vortexgrafieken al te zien was. Hier is op te zien dat de paren voor $\theta = 0$ al snel meer BCS-achtig worden daar ze op grotere golfvector k liggen. De andere paren op $\theta = \pi$ worden daarentegen juist meer BEC-achtig. Het gemiddelde van de twee is monotoon groeiend als functie van de afstand tot de rotatie-as. Dit bevestigt dat bij de rotatie van één component netto de fermionische paren meer van het BCS-type worden op grote afstanden van de rotatie-as. Dit kan ook op vaste afstanden tot de rotatie-as $k_F r = 3$ en $k_F r = 14$ als functie van de hoek θ gedaan worden om zo effectieve Fermi sferen in de LDA te bekomen. De resultaten zijn te zien in figuren (37) en (38).

Om de bevindingen voor het verschil tussen de rotatie van één component en rotatie van beide componenten tot nu toe samen te vatten:

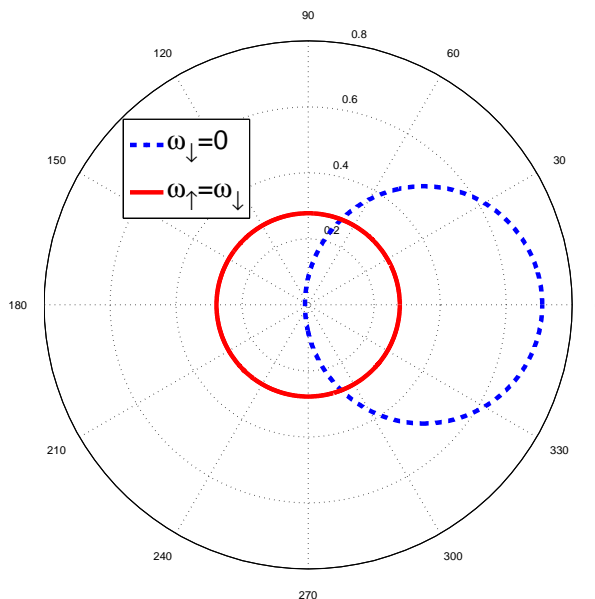
- De vortexkern is groter bij ééncomponentenrotatie dan bij normale rotatie van beide componenten
- De paarcorrelatielengte van de paren is kleiner dicht bij de rotatie-as en groter ver van de rotatie-as wanneer deze vergeleken wordt met normale rotatie.
- De deeltjesdichtheid bij ééncomponentenrotatie is niet meer uniform in nulde-orde en wijst op een verplaatsing van de deeltjes naar de randen van de container toe.
- De bestudeerde effectieve Fermi sferen lijken dit allemaal ook te bevestigen. Dicht bij de rand van de container worden de LDA Fermi sferen meer opgevuld (en verschoven). De deeltjes waarmee dit gebeurt zijn afkomstig uit het centrum van de container waardoor de Fermi sferen daar kleiner worden.



Figuur 36: De oplossingen van $k^2 - \mu_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = 0$ op parallelle en antiparallelle oriëntatie van \mathbf{k} en \mathbf{A}_\uparrow als functie van de afstand tot de rotatie-as, waarbij de zadelpuntoplossing voor μ_{sp} gebruikt werd. Het gemiddelde van deze twee oplossingen en de oplossing zonder rotatie is hier ook op te vinden.



Figuur 37: De oplossing van $k^2 - \mu_{\mathbf{k}}(r) = 0$ naar de grootte van \mathbf{k} als functie van θ voor een vaste $k_F r = 3$ en $\omega = 0.1\omega_F$.



Figuur 38: De oplossing van $k^2 - \mu_{\mathbf{k}}(r) = 0$ naar de grootte van \mathbf{k} als functie van θ voor een vaste $k_F r = 3$ en $\omega = 0.1\omega_F$.

Deze punten lijken te impliceren dat wanneer enkel één component geroteerd wordt er een bijkomende centrifugale kracht aanwezig is op het niveau van de paren. In de volgende subsectie wordt dit op een semiklassieke manier verklaard.

5.3 Interpretatie

5.3.1 Effect van rotatie op klassieke systemen

Beschouw eerst de klassieke Hamiltoniaan in het roterende assenstelsel:

$$H_{rot} = \frac{p^2}{2m} - \mathbf{p} \cdot (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}), \quad (5.10)$$

waarbij \mathbf{p} de zogenaamde canonieke impuls is, maar gelijk is aan de impuls zoals gemeten in het labstelsel. De positie \mathbf{r} wordt gemeten in het roterende stelsel. Dit speelt geen grote rol in de volgende bespreking daar enkel tijdsonafhankelijke configuraties beschouwd worden. Indien \mathbf{p} in het roterende stelsel geschreven wordt $\mathbf{p} = m\mathbf{v}_{rot} + m\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}$, en ingevuld wordt in de Hamiltoniaan, resulteert dit in:

$$H_{rot} = \frac{p^2}{2m} - m\mathbf{v}_{rot} \cdot (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}) - m(\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r})^2. \quad (5.11)$$

Hier worden de twee termen van het Coriolis effect en de centrifugale afstoting in het roterende stelsel duidelijk zichtbaar. De $-\mathbf{p} \cdot (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r})$ term in (5.10) bevat dus beide effecten impliciet. Omdat de paarvorming en kwantisatie in het labstelsel gebeurt, is het nuttiger om de energie wel degelijk op de manier zoals in (5.10) te beschouwen en niet zoals in (5.11). Laten we even stilstaan bij de Hamiltoniaan (5.10) en een deeltje in vacuum beschouwen. De eerste term verhoogt de energie bij toename in impuls

terwijl de tweede term bij een juiste oriëntatie van de impuls de energie juist verlaagt. Er moet dus een minimum bestaan. Als de energie geminimaliseerd wordt ifv. \mathbf{p} is het eenvoudig om te zien dat de optimale oplossing gegeven wordt door:

$$\mathbf{p} = m(\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}). \quad (5.12)$$

Dit is inderdaad een bevestiging dat de Hamiltoniaan (5.10) een deeltje beschrijft dat geroteerd wordt, en de optimale oplossing een meeroterend deeltje is. Deze energie kan terug in (5.10) ingevuld worden om te vinden dat:

$$H_{rot} = -\frac{m}{2}(\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r})^2. \quad (5.13)$$

De energie zou in theorie nog verder geminimaliseerd kunnen worden door \mathbf{r} te verhogen, maar dit is voor een vrij deeltje natuurlijk niet toegelaten wegens het behoud van draaiimpuls. Indien dit geen zorg is zoals in experimenten waarbij het gas extern geroerd wordt, is het duidelijk dat het voor deeltjes op kleine afstand tot de rotatie-as voordelig is om naar een grotere afstand te bewegen. Hierrond zijn er veel didactische experimenten te vinden met klassieke vloeistoffen waarbij op hoge rotatiefrequenties de vloeistof tegen de wand geduwd wordt tot de onsamendrukbaarheid van de vloeistof dit tegenhoudt. Beschouw bijvoorbeeld een korrel zand in een test tube die dan geroteerd wordt, de zandkorrel zal uiteindelijk op de maximale afstand van de rotatie-as belanden. Het punt van deze bespreking is, dat het klassieke effect van de $-\mathbf{p} \cdot (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r})$ term het gas mee laat roteren en indien de draaiimpuls niet behouden moet blijven zal deze term ook met een centrifugale kracht overeenkomen. Natuurlijk kost een kromming van de golffunctie van het condensaat in superfluida veel energie waardoor dit effect snel tegengewerkt zal worden door de zogenaamde kwantumdruk van het condensaat en in vortex-achtige dichtheidsprofielen zal resulteren.

5.3.2 Semiklassieke interpretatie voor rotatie van fermionische paren

Voor fermionische paren kan het effect van rotatie in een semiklassieke beschouwing op twee niveaus beschouwd worden. Eerst wordt het niveau van het macroscopisch veld beschouwd waarbij de fermionische paren in deze beschouwing sterk gebonden bosonen vormen. De vrije energie op dit niveau wordt gegeven door:

$$F = \int d\mathbf{r} \Omega_s(w) + C |\nabla\Psi|^2 - E(\nabla w)^2 + i \left[D \left(\frac{\mathbf{A}_\uparrow + \mathbf{A}_\downarrow}{2} \right) + U \left(\frac{\mathbf{A}_\downarrow - \mathbf{A}_\uparrow}{2} \right) \right] \cdot (\Psi^* \nabla\Psi - \Psi \nabla\Psi^*). \quad (5.14)$$

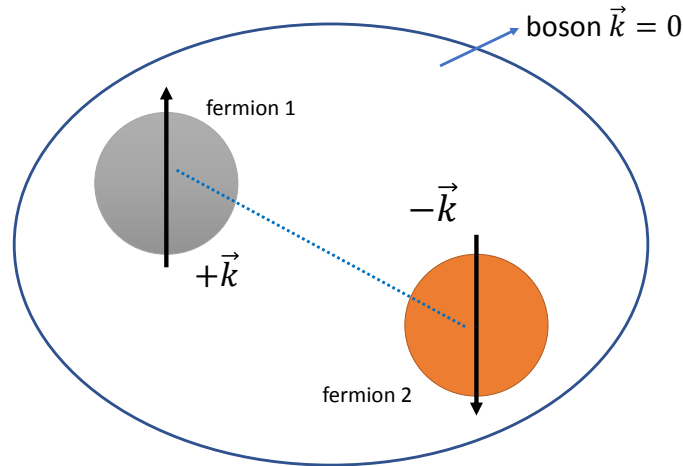
Hier is een duidelijke analogie met de klassieke rotatie energie (5.10) in te herkennen. De laatste term met de factor D , lineair in $\nabla\Psi$, is precies de extra rotatieterm op niveau van het bosonisch veld:

$$D \left(\frac{\mathbf{A}_\uparrow + \mathbf{A}_\downarrow}{2} \right) \cdot (\Psi^* \nabla\Psi - \Psi \nabla\Psi^*). \quad (5.15)$$

Het is precies deze term die het centrifugale effect geeft dat besproken werd in de vorige subsectie. Deze term is aanwezig voor beide typen van rotatie $\mathbf{A}_\uparrow = \mathbf{A}_\downarrow$ of $\mathbf{A}_\downarrow = 0$. In het tweede geval van ééncomponentrotatie waarbij één van de twee termen \mathbf{A} aan nul gelijk gesteld wordt, halveert de sterkte van dit effect. Dit bevestigt wel degelijk dat dit de rotatie van de bosonen beschrijft alsof dit puntdeeltjes zijn. Indien we slechts een rotatiepotentiaal op de helft van het deeltje laten inwerken (dus enkel op de opwaartse spin) is het equivalent met een half zo sterke rotatie. Deze term zorgt voor het

ontstaan van een vortexstructuur in het bosonisch veld $\Psi(\mathbf{r})$ wat het centrifugale effect uit de vorige bespreking op niveau van de bosonen samenvat.

Natuurlijk is er ook het niveau van de fermionen dat belangrijk zal blijken te zijn. De nulde-orde vrije energie Ω bevat informatie over de paarvorming waarbij bosonen zonder netto impuls gevormd worden. Het is precies deze eis samen met de energetische effecten van rotatie op niveau van de individuele fermionen die bij ééncomponentrotatie tot een extra centrifugale kracht zal leiden.



Figuur 39: Een semiklassiek beeld van de vorming van een fermionisch paar op niveau van de nulde-orde vrije energie Ω .

Om dit beter begrijpen is het illustratief om een semiklassieke redenering te maken. Op dit niveau zijn er namelijk afzonderlijke Hamiltonianen voor beide componenten van het gas die herschreven zijn vertrekkend van (5.10) met behulp van $\mathbf{A} = m(\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r})$:

$$H_{rot,\uparrow} = \frac{p_{\uparrow}^2}{2m} - \frac{\mathbf{p}_{\uparrow}}{m} \cdot \mathbf{A}_{\uparrow}, \quad (5.16)$$

$$H_{rot,\downarrow} = \frac{p_{\downarrow}^2}{2m} - \frac{\mathbf{p}_{\downarrow}}{m} \cdot \mathbf{A}_{\downarrow}. \quad (5.17)$$

De oorspronkelijke actie van het Fermi gas werd precies op dit niveau in hoofdstuk 2 geformuleerd. Het is ook op dit niveau dat het verschil tussen de rotatie van beide componenten en de rotatie van één component begrepen kan worden. In het unitariteitsregime of verder aan de BEC-kant zijn de paren redelijk gelokaliseerd. Hieruit volgt dat wanneer \mathbf{A}_{\uparrow} en \mathbf{A}_{\downarrow} gelijk zijn bij normale rotatie de fermionen in een paar zich min of meer op dezelfde positie bevinden en dus dezelfde macroscopische \mathbf{A} voelen. De fermionen in een paar zitten echter op een tegengestelde impuls $\mathbf{p}_{\uparrow} = -\mathbf{p}_{\downarrow}$. Hierdoor is het duidelijk dat beide energetische effecten elkaar opheffen in (5.16) en (5.17) door de tegengestelde oriëntatie van de deeltjes. De totale klassieke energie van een paar wordt dan:

$$H_{rot} = \frac{(p_{\uparrow}^2 + p_{\downarrow}^2)}{2m}. \quad (5.18)$$

Indien de twee rotatiepotentialen \mathbf{A}_{\uparrow} en \mathbf{A}_{\downarrow} echter niet gelijk zijn aan elkaar bij componentsgewijze rotatie is dit duidelijk niet meer het geval. De totale energie is dan gelijk aan:

$$H_{rot} = \frac{(p_{\uparrow}^2 + p_{\downarrow}^2)}{2m} - \left(\frac{\mathbf{p}_{\uparrow}}{m} \cdot \mathbf{A}_{\uparrow} - \frac{\mathbf{p}_{\downarrow}}{m} \cdot \mathbf{A}_{\downarrow} \right). \quad (5.19)$$

Indien $\mathbf{A}_{\downarrow} = 0$ genomen wordt geeft (5.19) aanleiding tot een extra rotatieterm in \mathbf{A}_{\uparrow} die niet aanwezig is bij de rotatie van beide componenten wegens de voorwaarde dat de paren op tegengestelde impuls vormen. Deze redenering kan ook op een andere manier beschouwd worden. In de Thomas-Fermi benadering worden potentialen meegenomen op de volgende manier:

$$\mu \rightarrow \mu - V(\mathbf{r}). \quad (5.20)$$

Indien de extra termen in (5.16) en (5.17) als potentiaaltermen meegenomen worden resulteert de Thomas-Fermi benadering voor de gemiddelde potentiaal van een gelokaliseerd fermion paar in:

$$\mu_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \mu_0 + \frac{1}{2m} (\mathbf{p}_{\uparrow} \cdot \mathbf{A}_{\uparrow} + \mathbf{p}_{\downarrow} \cdot \mathbf{A}_{\downarrow}). \quad (5.21)$$

In de eenheden die we gebruikten om de kwantummechanische actie te formuleren, wordt dit:

$$\mu_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \mu_0 + (\mathbf{k}_{\uparrow} \cdot \mathbf{A}_{\uparrow} + \mathbf{k}_{\downarrow} \cdot \mathbf{A}_{\downarrow}). \quad (5.22)$$

Voor de fermionen in een fermionisch paar zijn de impulsvectoren juist tegengesteld $\mathbf{k}_{\downarrow} = -\mathbf{k}_{\uparrow}$ en vereenvoudigt de chemische potentiaal zich tot:

$$\mu_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \mu_0 + \mathbf{k} \cdot (\mathbf{A}_{\uparrow} - \mathbf{A}_{\downarrow}). \quad (5.23)$$

Dit is precies de LDA chemische potentiaal die uit de kwantummechanische berekeningen in dit werk resulteerde. Het effect van de rotatie op de individuele fermionen in een paar zit dus onder andere vervat in $\mu_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$. Natuurlijk zijn er nog andere bijdragen zoals $\zeta_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ maar deze zijn niet van belang voor de huidige bespreking. In conclusie lijkt het erop dat door de eis van paarvorming op tegengestelde impulsen de fermionische paren een extra sterke centrifugale kracht ondervinden wanneer de rotatiefrequenties niet gelijk zijn aan elkaar.

5.4 Een omzetting naar SI eenheden

In 2005 observeerde de groep van W.Ketterle vortexroosters langs de BCS-BEC crossover [28] in een Fermi condensaat van ${}^6\text{Li}$ atomen. De vortices werden waargenomen voor de waarden van de interactieparameter van $(k_F a_s)^{-1} = -1.2$ tot $(k_F a_s)^{-1} = 3.8$. Het was niet altijd mogelijk om een uniforme temperatuur voor het condensaat te bepalen, maar wanneer een groot deel van het gas ($\approx 80\%$) zich in de superfluïde fase bevond kon de temperatuur $T = 0.07T_F$ gebruikt worden. De belangrijkste waarde voor deze bespreking die de auteurs meegeven is de experimentele waarde voor de Fermi golfvector:

$$k_F^{-1} = 0.3\mu\text{m}. \quad (5.24)$$

Omdat de experimentele groep onderzoek deed naar vortexroosters bestaande uit veel vortices en de eigenschappen hiervan, is het niet illustratief om de resultaten rechte reeks te vergelijken. Bovendien werden de waarnemingen niet in-situ gedaan, waardoor de gemeten grootte van de vortices niet noodzakelijk met de grootte hiervan tijdens de rotatie overeenkomt. Deze golfvector kan echter wel gebruikt worden om een beeld te krijgen van de schaal van de gebruikte en gevonden grootheden in dit werk. In

hoofdstuk 4 worden de numerieke berekeningen gemaakt voor een container met straal $k_F R = 15$ wat overeenkomt met:

$$R = 4.5\mu\text{m}. \quad (5.25)$$

Voor de rotatie van beide componenten was de grootte van de vortexkern $k_F R_v \approx 2$ en voor de rotatie van één component bereikte de kern een maximale grootte⁴ van $k_F Q_v \approx 6$. Dit is te zien in figuur (26). In SI eenheden zou dit gelijk zijn aan:

$$R_v(\omega_\uparrow = \omega_\downarrow) = 0.6\mu\text{m}, \quad (5.26)$$

$$R_v(\omega_\downarrow = 0) = 1.8\mu\text{m}. \quad (5.27)$$

In dezelfde figuur (26) zijn ook de kritische rotatiefrequenties voor zowel het ontstaan van de vortex als de transitie naar de normale fase voor beide typen van rotatie te zien. De frequentie waarop de vortex ontstaat is voor de rotatie van beide componenten $\omega_{c,1} = 0.015\omega_F$ en voor ééncomponentenrotatie $\omega_{c,1} = 0.03\omega_F$. Hier is ω_F de Fermi frequentie $\omega_F = E_F/\hbar$. In SI eenheden worden deze frequenties:

$$\nu_{c,1}(\omega_\uparrow = \omega_\downarrow) = 140\text{Hz}, \quad (5.28)$$

$$\nu_{c,1}(\omega_\downarrow = 0) = 280\text{Hz}. \quad (5.29)$$

Voor de bovenste kritische frequentie waarop $\Delta \rightarrow 0$, geldt bij rotatie van beide componenten $\omega_{c,2} = 0.17\omega_F$ en bij ééncomponentenrotatie $\omega_{c,2} = 0.25\omega_F$. In SI eenheden worden deze bovenste kritische frequenties:

$$\nu_{c,2}(\omega_\uparrow = \omega_\downarrow) = 1.58\text{kHz}, \quad (5.30)$$

$$\nu_{c,2}(\omega_\downarrow = 0) = 2.33\text{kHz}. \quad (5.31)$$

⁴Hier wordt de grootte Q_v uit sectie 4.4 gebruikt omdat op deze groottes de normalisatie van de hyperbolische tangens in rekening genomen moet worden.

6 Conclusie

In deze masterthesis werden enkele eigenschappen van superfluiditeit en vortices bij componentsgewijze rotatie onderzocht. In het begin van dit werk werd eerst besproken hoe Fermi gassen een grotere vrijheid aan experimentele manipulatie bieden dan andere ultrakoude systemen zoals BEC's of supergeleiders. Een mogelijke vrijheidsgraad die voor zover geweten nog niet in de context van vortices theoretisch noch experimenteel onderzocht is geweest, is om de verschillende componenten van een Fermi gas op verschillende frequenties te roteren. Terwijl de vrijheid om allerlei verschillende verhoudingen van frequenties te nemen hierin groot is, werd in dit werk de studie beperkt tot rotatie van beide componenten $\omega_{\uparrow} = \omega_{\downarrow}$ of de rotatie van één component waarbij $\omega_{\uparrow} \neq 0$ en $\omega_{\downarrow} = 0$.

De eerste vraag bestond eruit om na te gaan of superfluiditeit a priori nog mogelijk is bij componentsgewijze rotatie. Het zou immers mogelijk zijn dat bij de start van deze ongewone rotatie het condensaat onmiddellijk in de normale fase zou overgaan. Om dit te onderzoeken werd de effectieve veldentheorie (EFT) voor fermionische superfluida uit [32] gebruikt. De rotatie werd meegenomen door de verschillende tijdsafhankelijke rotatiepotentialen voor de respectievelijke componenten in verschillende meeroterende referentiestelsels te beschouwen. Omdat de effecten van rotatie op enige stabiliteit van de superfluïde fase in het condensaat al in een uniform systeem merkbaar moeten zijn, werd deze vraag met behulp van de nulde-orde EFT term bestudeerd. Dit is de zogenaamde zadelpuntsbenadering waarin alle gradiënten van het macroscopisch veld niet meegenomen worden en enkel de effecten van rotatie op de homogene bindingsenergie van de paren Δ beschouwd worden. Om de afleiding analytisch te kunnen doen moest hier de local density benadering (LDA) gebruikt worden waarbij verondersteld wordt dat de macroscopische en microscopische veranderingen op verschillende schalen plaatsvinden. Dit resulteerde in een vrije energie met twee onbekende parameters μ en Δ die bepaald moesten worden door numeriek simultaan twee integraalvergelijkingen op te lossen. Hiermee werden enkele algemene eigenschappen van het fermionische gas bestudeerd. Wanneer enkel één component geroteerd werd bleek dat het energetisch voordelig bleef om in de superfluïde fase te blijven zolang de frequentie van de rotatie onder een kritische waarde bleef. Dit beantwoordt de eerste onderzoeksvraag waaruit de conclusie volgt dat de superfluïde toestand kan bestaan bij componentsgewijze rotatie.

De volgende onderzoeksvraag bestond eruit om te onderzoeken of vortices nog steeds geïnduceerd worden wanneer enkel één component geroteerd wordt en om de vortexstructuur met de vortex bij gewone rotatie te vergelijken. Hiervoor moest de expansie tot op tweede orde gradiënten van het bosonisch veld in de EFT gemaakt worden. De termen die lineair waren in de rotatiepotentialen \mathbf{A}_{\uparrow} en \mathbf{A}_{\downarrow} werden enkel tot op eerste orde gradiënten meegenomen. Een groot deel van het werk in deze context bestond eruit om de extra termen af te leiden ten gevolge van de componentsgewijze rotatie die niet aanwezig waren bij de rotatie van beide componenten. Uiteindelijk werd de vrije energie dichtheid voor het Fermi gas gevonden die gelijkenissen met de Ginzburg-Landau vrije energie vertoont. De coëfficiënten voor de respectievelijke termen zijn echter plaatsafhankelijk en volgen uit een integratie over de reciproke ruimte. Een ander significant deel van het werk bestond eruit om alles op een numeriek stabiele manier te implementeren. Met deze vrije energie werden vervolgens vortices energetisch bestudeerd. De keuze werd gemaakt om dit onderzoek variationeel in het unitariteitsregime voor $(k_F a_s)^{-1} = 0.5$ te doen en een harde-wand container als opsluiting te gebruiken. De resultaten tonen aan dat vortices bij ééncomponentrotatie nog steeds geïnduceerd worden en dat hiervan de vortexkern bij toenemende rotatiefrequentie snel groter wordt dan de vortexkern van vortices bij gewone rotatie.

Om dit gedrag te interpreteren werd er naar de paarcorrelatielengte, de deeltjesdichtheid en lokale

Fermi sferen gekeken. De resultaten wijzen erop dat wanneer enkel één component geroteerd wordt paren vanuit het centrum van de container naar de rand geduwd worden. Hierbij worden de lokale LDA Fermi sferen aan de rand meer opgevuld en verschoven terwijl de Fermi sferen in de buurt van de rotatie-as juist leger worden. Bijgevolg worden de paren in het centrum van de container meer van het BEC type terwijl paren aan de rand van de container meer van het BCS type worden. Dit gedrag werd vervolgens op het semiklassieke niveau geïnterpreteerd. Hieruit blijkt dat de eis voor het vormen van paren met tegengestelde impuls in het labstelsel een cruciale rol speelt. Dit heeft te maken met het feit dat in de nulde-orde term van de EFT voor normale rotatie de tegengestelde impulsen in een fermionisch paar elkaar energetisch opheffen. Wanneer enkel de component met opwaartse spin geroteerd wordt, voelt elk paar ook op niveau van de fermionen de rotatie. Kwantummechanisch betekent dit dat bij rotatie van enkel de component met opwaartse spin, meer paren gevormd worden waarvan deze spin lokaal met de rotatie mee gealigneerd is. Het is energetisch voordeliger om deze paren op een grotere afstand van de rotatie-as te vormen waardoor dit in een additioneel centrifugaal effect op niveau van de fermionen resulteert.

Een interpretatie op niveau van tweede kwantisatie vraagt om een diepere studie naar fermionische paren bij de manipulatie van enkel één component waaruit de paren bestaan. In deze context zou het mogelijk illustratief zijn om de vergelijking met de zogenaamde FFLO fase te maken waarbij beide componenten in een BCS condensaat verschillende effectieve potentialen voelen. Er zouden immers significante correcties kunnen plaatsvinden door zelfs in de nulde-orde EFT term de vorming van paren op een niet-nul impuls toe te laten. Een ander punt waar verder onderzoek naar gedaan kan worden is de nauwkeurigheid van de LDA benadering. Deze werd uitgevoerd om het resultaat nog steeds in Nambu-spinor notatie te schrijven waardoor de padintegraal uitgevoerd kan worden. Het zou mogelijk zijn dat andere benaderingen voorbij de LDA nog steeds zouden toelaten om de padintegratie uit te voeren zonder Nambu-spinoren te moeten invoeren. Verder zijn er nog enkele specifieke zaken in de gebruikte methodes waar benaderingen in schuilen zoals bijvoorbeeld de variationele aanpak die doorheen dit werk besproken zijn geweest.

Referenties

- [1] Bose. Plancks gesetz und lichtquantenhypothese. *Zeitschrift für Physik*, 26(1):178–181, Dec 1924.
- [2] E. P. Gross. Structure of a quantized vortex in boson systems. *Il Nuovo Cimento (1955-1965)*, 20(3):454–477, May 1961.
- [3] LP Pitaevskii. Vortex lines in an imperfect bose gas. *Sov. Phys. JETP*, 13(2):451–454, 1961.
- [4] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell. Observation of bose-einstein condensation in a dilute atomic vapor. *Science*, 269(5221):198–201, 1995.
- [5] K. B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle. Bose-einstein condensation in a gas of sodium atoms. *Phys. Rev. Lett.*, 75:3969–3973, Nov 1995.
- [6] C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollett, and R. G. Hulet. Evidence of bose-einstein condensation in an atomic gas with attractive interactions. *Phys. Rev. Lett.*, 75:1687–1690, Aug 1995.
- [7] Enrico Fermi and A Zannoni. On the quantization of the monoatomic ideal gas. *Rendiconti Lincei*, 3:145–149, 1926.
- [8] P. A. M. Dirac. On the theory of quantum mechanics. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 112(762):661–677, 1926.
- [9] LD Landau and VI Ginzburg. K teorii sverkhrovodimosti. *Zh. Eksp. Teor. Fiz*, 20(1064):546–568, 1950.
- [10] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer. Microscopic theory of superconductivity. *Phys. Rev.*, 106:162–164, Apr 1957.
- [11] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer. Theory of superconductivity. *Phys. Rev.*, 108:1175–1204, Dec 1957.
- [12] Lev Petrovich Gorkov. Microscopic derivation of the ginzburg-landau equations in the theory of superconductivity. *Sov. Phys. JETP*, 9(6):1364–1367, 1959.
- [13] A. J. Moerdijk, B. J. Verhaar, and A. Axelsson. Resonances in ultracold collisions of ${}^6\text{Li}$, ${}^7\text{Li}$, and ${}^{23}\text{Na}$. *Phys. Rev. A*, 51:4852–4861, Jun 1995.
- [14] C. A. Regal and D. S. Jin. Measurement of positive and negative scattering lengths in a fermi gas of atoms. *Phys. Rev. Lett.*, 90:230404, Jun 2003.
- [15] J. J. Sakurai. *Modern Quantum Mechanics*. Pearson Education, 2006.
- [16] M. M. Parish. *The BCS-BEC Crossover*, pages 179–197. World Scientific Publishing Co, September 2015.
- [17] B. DeMarco and D. S. Jin. Onset of fermi degeneracy in a trapped atomic gas. *Science*, 285(5434):1703–1706, 1999.

- [18] C. A. Regal, M. Greiner, and D. S. Jin. Observation of resonance condensation of fermionic atom pairs. *Phys. Rev. Lett.*, 92:040403, Jan 2004.
- [19] J. Kinast, S. L. Hemmer, M. E. Gehm, A. Turlapov, and J. E. Thomas. Evidence for superfluidity in a resonantly interacting fermi gas. *Phys. Rev. Lett.*, 92:150402, Apr 2004.
- [20] T. Bourdel, L. Khaykovich, J. Cubizolles, J. Zhang, F. Chevy, M. Teichmann, L. Tarruell, S. J. J. M. F. Kokkelmans, and C. Salomon. Experimental study of the bec-bcs crossover region in lithium 6. *Phys. Rev. Lett.*, 93:050401, Jul 2004.
- [21] C. Chin, M. Bartenstein, A. Altmeyer, S. Riedl, S. Jochim, J. Hecker Denschlag, and R. Grimm. Observation of the pairing gap in a strongly interacting fermi gas. *Science*, 305(5687):1128–1130, 2004.
- [22] G. B. Partridge, K. E. Strecker, R. I. Kamar, M. W. Jack, and R. G. Hulet. Molecular probe of pairing in the bec-bcs crossover. *Phys. Rev. Lett.*, 95:020404, Jul 2005.
- [23] JN Rjabinin and LW Shubnikow. Magnetic properties and critical currents of supra-conducting alloys. *Nature*, 135(3415):581, 1935.
- [24] Alexei A Abrikosov. On the magnetic properties of superconductors of the second group. *Sov. Phys. JETP*, 5:1174–1182, 1957.
- [25] Alexander L Fetter and Anatoly A Svidzinsky. Vortices in a trapped dilute bose-einstein condensate. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 13(12):R135, 2001.
- [26] M. R. Matthews, B. P. Anderson, P. C. Haljan, D. S. Hall, C. E. Wieman, and E. A. Cornell. Vortices in a bose-einstein condensate. *Phys. Rev. Lett.*, 83:2498–2501, Sep 1999.
- [27] E. A. L. Henn, J. A. Seman, G. Roati, K. M. F. Magalhães, and V. S. Bagnato. Emergence of turbulence in an oscillating bose-einstein condensate. *Phys. Rev. Lett.*, 103:045301, Jul 2009.
- [28] M. W. Zwierlein, J. R. Abo-Shaeer, A. Schirotzek, C. H. Schunck, and W. Ketterle. Vortices and superfluidity in a strongly interacting fermi gas. *Nature*, 435:10471051, Jun 2005.
- [29] M. Machida and T. Koyama. Structure of a quantized vortex near the bcs-bec crossover in an atomic fermi gas. *Phys. Rev. Lett.*, 94:140401, Apr 2005.
- [30] M. Iskin and C. A. R. Sá de Melo. Mixtures of ultracold fermions with unequal masses. *Phys. Rev. A*, 76:013601, Jul 2007.
- [31] S. K. Adhikari. Nonlinear schrödinger equation for a superfluid fermi gas in the bcs-bec crossover. *Phys. Rev. A*, 77:045602, Apr 2008.
- [32] S. N. Klimin, J. Tempere, and J. T. Devreese. Finite-temperature effective field theory for dark solitons in superfluid fermi gases. *Phys. Rev. A*, 90:053613, Nov 2014.
- [33] G. Lombardi. *Effective field theory for superfluid Fermi gases, application to polarons and solitons*. PhD thesis, University of Antwerp, 2017.
- [34] G. Lombardi, W. Van Alphen, S. N. Klimin, and J. Tempere. Soliton-core filling in superfluid fermi gases with spin imbalance. *Phys. Rev. A*, 93:013614, Jan 2016.

- [35] G. Lombardi, W. Van Alphen, S. N. Klimin, and J. Tempere. Snake instability of dark solitons across the bec-bcs crossover: An effective-field-theory perspective. *Phys. Rev. A*, 96:033609, Sep 2017.
- [36] S. N. Klimin, J. Tempere, N. Verhelst, and M. V. Milošević. Finite-temperature vortices in a rotating fermi gas. *Phys. Rev. A*, 94:023620, Aug 2016.
- [37] K. W. Madison, F. Chevy, W. Wohlleben, and J. Dalibard. Vortex formation in a stirred bose-einstein condensate. *Phys. Rev. Lett.*, 84:806–809, Jan 2000.
- [38] Krzysztof Sacha and Dominique Delande. Proper phase imprinting method for a dark soliton excitation in a superfluid fermi mixture. *Phys. Rev. A*, 90:021604, Aug 2014.
- [39] Meng Gao, Hongyu Wu, and Lan Yin. Vortex properties of a resonant superfluid. *Phys. Rev. A*, 74:023604, Aug 2006.
- [40] R. L. Stratonovich. On a Method of Calculating Quantum Distribution Functions. *Soviet Physics Doklady*, 2:416, July 1957.
- [41] J. Hubbard. Calculation of partition functions. *Phys. Rev. Lett.*, 3:77–78, Jul 1959.
- [42] N. Nagaosa and S. Heusler. *Quantum Field Theory in Condensed Matter Physics*. Texts and monographs in physics. Springer, 1999.
- [43] H.T.C. Stoof, D.B.M. Dickerscheid, and K. Gubbels. *Ultracold Quantum Fields*. Theoretical and Mathematical Physics. Springer Netherlands, 2008.
- [44] S. N. Klimin N. Verhelst and J.Tempere. Verification of an analytic fit for the vortex core profile in superfluid fermi gases. *Physica C: Superconductivity and its Applications*, 533:96 – 100, 2017. Ninth international conference on Vortex Matter in nanostructured Superconductors.
- [45] G. Lombardi, W. Van Alphen, S. N. Klimin, and J. Tempere. Soliton core filling in superfluid fermi gases with spin imbalance. *Phys. Rev. A*, 93:013614, Jan 2016.