



Relativistische beschrijving van koude gassen

Proefschrift ingediend op 25 mei 2010 te Antwerpen door Illya
Fonteyn met het oog op het behalen van de titel Master in de
fysica.

Promotor: Prof. dr. Jacques Tempère

Woord Vooraf

Na 5 jaar studie aan de Universiteit Antwerpen ben ik met dit werk aan de laatste rechte lijn gekomen van mijn opleiding. In de afgelopen 5 jaar heb ik enorm veel bijgeleerd en dan vooral de laatste twee jaar.

Met dit woordje vooraf zou ik een aantal mensen willen bedanken. Ten eerste natuurlijk mijn promotor, Jacques. Hem wil ik bedanken voor het aanbieden van het onderwerp en het helpen begrijpen van enkele vooraanstaande fysische onderwerpen.

Ik zou ook graag iedereen in de groep TQC willen bedanken voor de interessante discussies tijdens de groepsbesprekingen, vooral dan Jeroen met wie ik het meest heb samengezeten. Ik zou hier ook de veelbesproken ‘Bamilezingen’ willen vernoemen, als een leuke manier om de verschillende onderzoeksthema’s van de groep te leren kennen.

Als laatste wil ik nog Annick bedanken voor de niet aflatende steun doorheen mijn master en de rest van mijn studie, en specifiek voor het nalezen van mijn thesis.

Samenvatting

Dit werk handelt over kwantumgassen die beschreven worden met een relativistische energie dispersie. Er is onderzocht wat deze verandering van dispersie tot gevolg heeft. Deze dispersie zou tot uiting komen bij hoge temperaturen en dichtheden, maar er zijn ook systemen die van nature uit een relativistische beschrijving nodig hebben zoals grafen.

Eerst is aangetoond dat voor een klassiek gas de relativistische beschrijving inderdaad nodig is bij hoge temperaturen. Er is een toestandsdichtheid bepaald die dit beschrijft. Deze toestandsdichtheid is vervolgens gebruikt om de kritische temperatuur van een Bose-Einsteincondensaat te bepalen. Er is een uitdrukking gevonden voor de kritische temperatuur en deze is vergeleken met de reeds bekende niet-relativistische beschrijving.

Dan is overgegaan op de beschrijving van Fermigassen door middel van de BCS theorie. In deze theorie is de kinetische energie gemodificeerd en is een parameter ingevoerd die beschrijft in welk regime men zit. De parameter is de verhouding tussen Fermigolfvector en de Comptongolfvector. Deze laatste duidt de lengteschaal aan waarop de relativistische effecten belangrijk worden. De bandkloofvergelijking voor een Fermigas is opgesteld voor een algemene energiedispersie. De renormalisatie is uitgebreid om het relativistische systeem te kunnen bestuderen en analytisch opgelost. Er is vergeleken met de limieten van niet-relativistisch en extreem relativistisch. Voor deze laatste is een analytische oplossing van de bandkloofvergelijking gevonden. De algemene bandkloofvergelijking is numeriek opgelost.

Vervolgens is de gevonden methodiek toegepast op een Fermigas waar er een onevenwicht heerst tussen de spin-op deeltjes en de spin-neer deeltjes. De bandkloofvergelijking is opgelost voor enkele specifieke keuzes van de ongelijkheid.

Summary

In this work quantum gasses are described with a relativistic energy dispersion. It is investigated how properties change due to this new dispersion. This dispersion becomes important at high temperatures and densities, but there are systems known where this description is needed on a natural basis, an example is graphene.

First it is shown that a relativistic description is necessary for a classical gas at high temperatures. The density of states which describes this is determined. Afterwards this density of states is used to calculate the critical temperature of a Bose-Einstein condensate. An expression is obtained for the critical temperature and is compared to the non-relativistic case.

Then the description of Fermi gasses is introduced by means of the BCS theory. The kinetic energy is adapted to match the relativistic dispersion and a parameter is introduced to determine in which regime one is looking. This parameter is the ratio of Fermi wave vector and the Compton wave vector. The latter is a measure for the length scale on which relativistic effects becomes important. The gap equation for a Fermi gas is introduced for a general energy dispersion. The renormalisation is adapted to the relativistic case and is solved analytically. A comparison with the non-relativistic and the extreme relativistic is made. For the latter an analytical solution is found. The general gap equation is solved numerically.

Afterwards the used methodology is applied to Fermi gas having an imbalance in spin components. The band gap equation is solved for specific choices of this imbalance.

Inhoudsopgave

Woord Vooraf	i
Samenvatting	ii
Summary	iii
1 Inleiding	1
1.1 Koude gassen en condensatie	1
1.2 Relativiteit in condensaten	3
1.3 Doelstellingen	4
2 Interacties tussen atomen in koude gassen	5
2.1 Verstrooiing	6
2.2 Contactinteractie	6
3 Het klassieke ideale gas	8
3.1 Maxwell-Boltzmann	8
3.1.1 Relativistische temperaturen	9
3.1.2 Gemiddelde snelheid	10
3.2 Relativistische snelheidsverdeling	10
3.2.1 Relativistische toestandsdichtheid	11
3.2.2 Maxwell-Jüttner verdeling	12
3.2.3 Gemiddelde snelheid	13
3.3 Vergelijking tussen klassiek en relativistisch	14
4 Bose Einstein condensatie	17
4.1 Niet-relativistische toestandsdichtheid	18
4.2 Relativistische toestandsdichtheid	19
4.2.1 Extreem relativistisch regime	21
5 Interagerend Fermigas	25
5.1 BCS-Hamiltoniaan	25
5.1.1 Bogoliubov spectrum	28
5.2 Vrije energie	30
5.3 Bandkloofvergelijking	32
5.3.1 Renormalisatie	34
5.3.2 Niet-relativistische regime	36
5.3.3 Extreem relativistisch regime	37
5.4 Oplossen van de bandkloofvergelijking	39

6 Fermigas met ongelijke spinpopulatie	44
6.1 Hamiltoniaan met ongelijke spincomponenten	45
6.2 Bandkloofvergelijking	48
6.3 Resultaten	48
7 Conclusie	54

Hoofdstuk 1

Inleiding

1.1 Koude gassen en condensatie

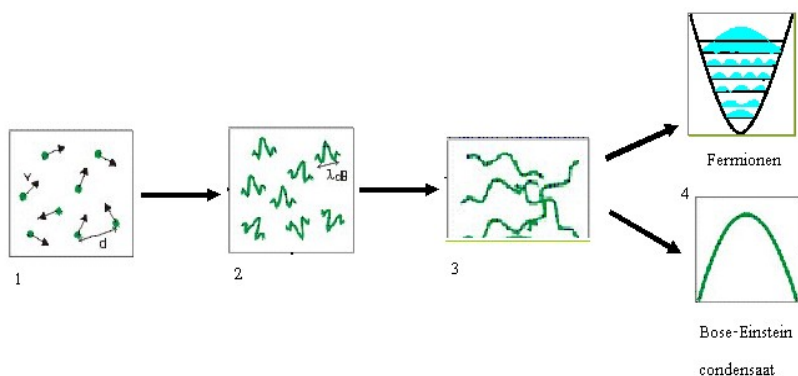
Deze thesis handelt over koude gassen. Maar wat wordt er bedoeld met koud? Met koud wordt bedoeld dat de kwantumeffecten een grote rol zullen spelen. Gassen uit het dagelijkse leven zijn dus in deze context niet koud te noemen. Het speelt immers geen rol of de deeltjes waaruit deze gassen bestaan fermionen zijn of bosonen.

Dit speelt wel een rol wanneer het gas wordt afgekoeld. Door het afkoelen van het gas zal de impuls van de deeltjes afnemen. Volgens de onzekerheidsrelatie van Heisenberg zal op dat moment de onzekerheid op de plaats toenemen. Hierdoor zal de golffunctie van de deeltjes meer en meer overlappen. Wanneer dat gebeurt, moet men rekening houden met de aard van de deeltjes, ze kunnen bosonisch zijn of fermionisch. Dit is weergegeven in figuur 1.1.

Wanneer de deeltjes bosonisch zijn zullen ze de Bose-Einstein statistiek volgen. Deze statistiek is ontwikkeld door Satyendra Nath Bose, een Indisch fysicus die in 1924 een artikel [1] schreef dat ging over statistiek van niet-onderscheidbare deeltjes. Hij kreeg het echter pas gepubliceerd nadat Albert Einstein het artikel had bevestigd.

De deeltjes die deze statistiek volgen werden bosonen genoemd, naar Bose, en hadden de eigenschap om met een willekeurig aantal in dezelfde kwantumtoestand te zijn. Dit leidt tot Bose-Einstein Condensatie (BEC). Wanneer een gas sterk wordt afgekoeld zullen er geen excitaties meer zijn en zullen de deeltjes in een zo laag mogelijke energietoestand plaatsnemen. Zo komen er meer en meer deeltjes in de grondtoestand terecht. Op een bepaald moment zijn dit er macroscopisch veel en gaan ze zich gedragen als 1 collectief deeltje, wanneer dit gebeurt spreekt men van een Bose-Einstein Condensaat, dit is getoond in figuur 1.2. Dit was in 1924 al voorspeld door Einstein [2] maar werd pas in 1995 experimenteel bevestigd door W. Ketterle [3], E. A. Cornell en C. E. Wiemann [4], die voor deze ontdekking de Nobelprijs in ontvangst mochten nemen in 2001. De reden dat de ontdekking zo lang heeft geduurd is dat de temperaturen waarop deze effecten zich manifesteren van de orde van een nanokelvin zijn. Hiervoor zijn zeer specifieke koelingstechnieken nodig.

Het BEC heeft een aantal interessante eigenschappen. De meest bekende is



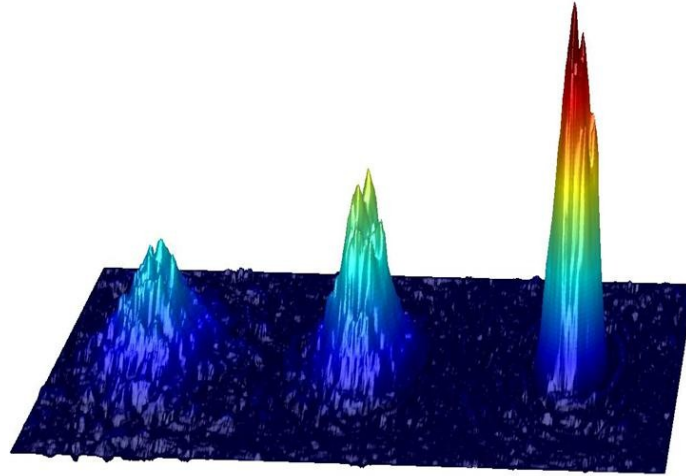
Figuur 1.1: Schematische voorstelling van het afkoelen naar een kwantumgas. 1: de deeltjes gedragen zich klassiek en worden voorgesteld door vliegende bolletjes. 2: het golfkarakter van de deeltjes wordt duidelijk en ze hebben een spreiding van de orde van de golflengte van de Broglie. 3: door afkoelen neemt de spreiding toe en begint de overlap. 4: Fermionen beginnen alle toestanden op te vullen te beginnen bij de grondtoestand (boven). Bosonen komen allemaal in de grondtoestand terecht en vormen een Bose-Einstein condensaat (onder).

wellicht superfluiditeit. Het BEC kon daarom de superfluiditeit van vloeibaar helium verklaren. Een andere eigenschap van het BEC is dat het zich gedraagt als een macroscopisch kwantumdeeltje. Wanneer men twee BEC's laat botsen, ziet men interferentiefrajes. Deze zijn een duidelijke manifestatie van het kwantummechanische karakter van het condensaat.

Zoals is voorgesteld in figuur 1.1 gebeurt er iets totaal anders met fermionen. Dit zijn deeltjes die de Fermi-Dirac statistiek volgen en ze zijn onderhevig aan het uitsluitingsprincipe van Pauli. Dit stelt dat er geen twee fermionen in dezelfde toestand mogen zitten. Bij afkoeling kan er dus maar 1 de grondtoestand bezetten.

Toch is het mogelijk dat fermionen een condensaat vormen en eigenschappen zoals superfluiditeit waar te nemen. De theorie die dit beschrijft is te danken aan Bardeen, Cooper en Schrieffer. De theorie was opgesteld om supergeleiding te verklaren in 1957 [6, 7]. Uit de resultaten van een aantal experimenten kon Cooper afleiden dat er in een supergeleider paren van elektronen ontstaan. Deze paren zijn dan bosonisch van aard en kunnen dus condenseren met superfluiditeit tot gevolg, alleen spreekt men bij elektronen in een materiaal van supergeleiding maar in principe is het hetzelfde.

Cooper baseerde zijn redenering op 3 belangrijke waarnemingen. De eerste waarneming is het bestaan van een bandkloof. Wanneer er voldoende energie wordt toegevoegd aan het systeem verdwijnt de supergeleiding, het is alsof de Cooperparen opbreken. De tweede waarneming is dat via de fluxquantisatie kon gemeten worden dat de ladingsdragers 2 keer de elektronlading dragen. En het derde waarneming is het verloop van de soortelijke warmte als functie van de temperatuur in een supergeleider zeer veel gemeenschappelijk had soortelijke



Figuur 1.2: Bose-Einstein condensatie. Op het linker deel is er nog geen condensatie. Op het rechterdeel is te zien dat er macroscopisch veel deeltjes in dezelfde toestand zitten (scherp gepiekte dichtheid). [5]

warmte verloop van een gecondenseerd Bose gas.

Het enige probleem met Cooperparen is dat elektronen elkaar zeer sterk afstoten door de Coulomb interactie en om een paar te vormen is er een netto aantrekking nodig. Samen met Bardeen en Schrieffer werd er voorgesteld dat de aantrekking er komt omdat door de uitwisseling van fononen er een netto aantrekkingskracht kon ontstaan. Dit alles tesamen was de grondslag voor de BCS theorie.

De BCS theorie is niet enkel geldig voor elektronen in een materiaal maar ook in atomaire Fermigassen, gassen die bestaan uit fermionen, waarin er een netto aantrekking heerst tussen de deeltjes.

De onderwerpen BEC en BCS theorie worden tegenwoordig op allerlei manieren bestudeerd omdat men opzoek is naar andere exotische eigenschappen van de condensaten en dit inzicht kan verschaffen in hoge temperatuur supergeleiding en het bestuderen van effecten uit de vaste stof, zoals het polaron [8].

In deze thesis zal gekeken worden naar het effect van het toevoegen van relativiteit aan de theorie van kwantumgassen. In de volgende sectie zal er worden uitgelegd waarom dit interessant kan zijn.

1.2 Relativiteit in condensaten

Sinds 2004 heeft men experimenteel grafeen kunnen maken. Grafeen is één enkele laag van koolstofatomen die een honingraatstructuur vormen. Het bestaan van dit materiaal leidde tot enkele verrassende eigenschappen. Zo bleek de ban-

denstructuur rond het Fermi-niveau lineair. Dit lineaire karakter van de energiedispersie rond het Fermi-niveau kan gezien worden als een relativistische dispersie. Wil men dus het mogelijk bestaan van supergeleiding in grafen bestuderen heeft men een duidelijke relativistische aanpak nodig.

Een andere manier om een relativistische dispersie te verkrijgen in een Fermi-gas is door de juiste keuze van de optische potentiaal [9], dit is een potentiaal die aangelegd wordt door een laser, hierdoor kan een soort roosterpotentiaal ontstaan.

Het voordeel van deze optische potentialen is dat ze veel ruimte laten voor afstelling van de eigenschappen van het rooster dat ze creëren. Er kunnen met dezelfde opstelling meerdere configuraties mogelijk zijn waardoor er meer informatie kan gewonnen worden.

Een ander mogelijkheid om relativistische effecten te verkrijgen is door een hoge temperatuur te gebruiken. Om dan nog steeds over kwantumgassen te spreken is een hoge dichtheid nodig. In het laboratorium is dit niet na te bootsen maar in sterren bestaan deze voorwaarden wel. Zo is er een mogelijkheid om via superfluiditeit bepaalde eigenschappen van neutronensterren te verklaren [10].

Er is tegenwoordig ook veel onderzoek naar het condenseren van elementaire deeltjes, zoals kleurafhankelijke superfluiditeit [11] en Pioncondensaten [12].

1.3 Doelstellingen

Deze thesis heeft als doel om relativiteit op een eenvoudige manier in rekening te brengen in kwantumgassen. Normaal heeft men om relativiteit te beschrijven een covariante theorie nodig.

In dit werk zal relativiteit in rekening gebracht worden door de kinetische energie, die kwadratisch is in de impuls, te vervangen door het relativistisch analogon. Deze begint kwadratisch maar gaat dan over op een lineaire relatie tussen energie en impuls, zoals bij grafen. Het verloop van de thesis is als volgt. Na deze inleiding volgt een kort hoofdstuk over de verstrooiingsprocessen in een kwantumgas. Dit is nodig omdat later enkele concepten uit de verstrooiingstheorie worden gebruikt.

In het volgende hoofdstuk, hoofdstuk 3 wordt het effect van een relativistische kinetische energie gebruikt om in een klassiek gas de Maxwell-Boltzmannverdeling te corrigeren. Er wordt verwacht dat voor hoge temperaturen de Maxwell-Boltzmannverdeling niet meer correct is. Hierin wordt ook de toestandsdichtheid van een gas op een relativistische manier beschreven. Deze toestandsdichtheid zal in het volgende hoofdstuk 4 worden gebruikt om de kritische temperatuur van een Bose-Einsteincondensaat te beschrijven voor hoge temperaturen en dichtheden.

Vervolgens wordt overgestapt op een Fermigas. Het superfluide Fermigas wordt beschreven volgens de BCS theorie. Er wordt verwacht dat wanneer het Fermi-energieniveau dicht bij de rustmassa van de deeltjes komt dat er een relativistische beschrijving nodig is. Er wordt onderzocht wat de effecten zijn van een relativistische dispersie op de bandkloofvergelijking. In het hoofdstuk dat daarop volgt wordt de situatie beschouwd waarbij er meer spin-op deeltjes dan spin-neer deeltjes aanwezig zijn in het gas.

Hoofdstuk 2

Interacties tussen atomen in koude gassen

In dit hoofdstuk wordt de interactie tussen atomen in een koud gas uitgelegd. Er worden begrippen zoals verstrooiingslengte gedefiniëerd. Hier wordt de afleiding gevolgd zoals gegeven in [13] en [14].

In een koud en ijl gas van atomen zullen atomen per twee interageren. Het kan dus beschreven worden als een tweedeeltjesprobleem. Hiervoor wordt de Hamiltoniaan gegeven door de kinetische energie termen van beide deeltjes en een interactie die enkel afhangt van de afstand tussen de twee deeltjes.

$$\hat{H} = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \quad (2.1)$$

Als overgegaan wordt op massacentrum- en relatieve coördinaten dan blijkt dat het massacentrum zich gedraagt als vrij deeltje.

$$\hat{H} = \frac{P^2}{2M} + \frac{p^2}{2m} + V(|\vec{r}|) \quad (2.2)$$

Waarin P en M de impuls en massa zijn van het massacentrumsysteem. De relatieve impuls en massa zijn geschreven als p en m . Er valt op dat de interactie bolsymmetrisch is. Het probleem is dus omgezet naar een ééndeltjesprobleem waarbij een deeltje invalt op een verstrooier met een sferische symmetrie.

In een probleem met sferische symmetrie kunnen de oplossingen ontbonden worden in termen van Legendrepolynomen, P_l . In een koud en ijl gas is het voldoende om enkel de term met $l = 0$ in rekening te brengen. Dit noemt men de s-golf benadering. Met een koud gas wordt bedoeld dat de impulsoverdracht veel kleiner is dan één over de typische afstand tussen de atomen, $k \ll 1/r$. Dit stelt een voorwaarde voor de relatie tussen temperatuur en dichtheid, vermits k samenhangt met de temperatuur en $1/r$ met de dichtheid.

2.1 Verstrooiing

Om het botsingsprobleem verder uit te werken wordt er gekeken naar de Schrödingervergelijking:

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle \quad (2.3)$$

Waarbij de Hamiltoniaan \hat{H} bestaat uit een deel \hat{H}_0 van een vrij deeltje en een potentiaal \hat{V} . Als $|\phi\rangle$ de eigenoplossing is van \hat{H}_0 , een vlakke golf, dan wordt de oplossing van de totale Hamiltoniaan gegeven door de Lippmann-Schwingervergelijking:

$$|\psi\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\delta} \hat{V} |\psi\rangle \quad (2.4)$$

In deze vergelijking is een infinitesimaal kleine δ ingevoerd om singulariteiten te vermijden.

Op grote afstand van de verstrooier wordt de Lippmann-Schwingervergelijking in coördinatenrepresentatie benaderd door:

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + f(\vec{k}', \vec{k}) \frac{e^{\pm ikr}}{r} \quad (2.5)$$

Op grote afstand bestaat de oplossing uit een vlakke golf met daarbij een uitdijende (+ oplossing) of imploderende (− oplossing) golf. De ingevoerde grootheid $f(\vec{k}', \vec{k})$ wordt de verstrooiingsamplitude genoemd.

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{2m}{4\pi\hbar^2} \langle \vec{k}' | \hat{V} | \psi \rangle \quad (2.6)$$

In de s-golf benadering kan men deze grootheid linken aan de verstrooiingslengte a_s .

$$f(\vec{k}', \vec{k} \rightarrow 0) = -a_s \quad (2.7)$$

2.2 Contactinteractie

Vermits de exacte interactie tussen twee deeltjes niet zomaar gekend is kan overgegaan worden op een pseudopotentiaal. Er is net gezien dat in de s-golfbenadering het interactieprobleem volledig bepaald wordt door de verstrooiingslengte. De pseudopotentiaal wordt dan zo gekozen dat dezelfde verstrooiingslengte verkregen wordt. De meest gebruikte en meeste eenvoudige pseudopotentiaal is de contactpotentiaal.

$$V(|\vec{r} - \vec{r}'|) = g\delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (2.8)$$

Nu dient nog de interactiesterkte g aangepast te worden aan de verstrooiingslengte. Om deze relatie te vinden wordt de \hat{T} -operator ingevoerd. Deze operator wordt de transitieoperator genoemd.

$$\hat{T} |\vec{k}\rangle = \hat{V} |\psi\rangle \quad (2.9)$$

Deze operator kan gebruikt worden om de verstrooiingsamplitude (2.6) om te schrijven naar:

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{2m}{4\pi\hbar^2} \langle \vec{k}' | \hat{T} | \vec{k} \rangle \quad (2.10)$$

HOOFDSTUK 2. INTERACTIES TUSSEN ATOMEN IN KOUDE GASSEN7

Hierdoor kan de transitieoperator gelinkt worden aan de verstrooiingslengte (2.7).

$$\langle \vec{k}' | \hat{T} | \vec{k} \rangle = \frac{2\pi\hbar^2 a_s}{m} \quad (2.11)$$

Om de transitieoperator in verband te brengen met de interactiesterkte g wordt deze ingevoerd in de Lippmann-Schwingervergelijking (2.4).

$$\hat{T} = \hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\delta} \hat{T} \quad (2.12)$$

Omzetten naar impulsrepresentatie:

$$\langle \vec{k} | \hat{T} | \vec{k}_0 \rangle = \langle \vec{k} | \hat{V} | \vec{k}_0 \rangle + \sum_{\vec{k}'} \langle \vec{k} | \hat{V} | \vec{k}' \rangle G(\vec{k}', \vec{k}') \langle \vec{k}' | \hat{T} | \vec{k}_0 \rangle \quad (2.13)$$

Hierin is de Greense functie ingevoerd:

$$\begin{aligned} G(\vec{k}', \vec{k}') &= \langle \vec{k}' | \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\delta} | \vec{k}' \rangle \\ &= \frac{2m}{\hbar^2} \frac{\langle \vec{k}' | \vec{k}' \rangle}{k_0^2 - k'^2 + i\delta} \end{aligned}$$

Omdat er bij lage energieën wordt gewerkt kan deze geschreven worden als:

$$G(\vec{k}', \vec{k}') = -\frac{2m}{k'^2 \hbar^2} \quad (2.14)$$

Vervolgens kan gebruikgemaakt worden van het feit dat een contactpotentiaal beschouwd wordt.

$$\begin{aligned} \langle \vec{k} | \hat{V} | \vec{k}_0 \rangle &= \int d\vec{r} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} V(\vec{r}) e^{i\vec{k}_0\cdot\vec{r}} \\ &= g \end{aligned}$$

Dit kan samen met (2.14) en (2.11) ingevuld worden in (2.13). Als deze dan recursief wordt ingevuld in zichzelf, dan bekomt men een relatie tussen a_s en g :

$$\begin{aligned} \frac{2\pi\hbar^2 a_s}{m} &= g \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(g \sum_{\vec{k}'} -\frac{2m}{k'^2 \hbar^2} \right)^n \right] \\ &= g \left[1 - g \sum_{\vec{k}'} -\frac{2m}{k'^2 \hbar^2} \right]^{-1} \end{aligned}$$

Wanneer hierin enkel de nulde orde term wordt overgehouden dan vindt men dat $g = 2\pi\hbar^2 a_s/m$, dit is de Born benadering. Hieruit volgt dan de uiteindelijke relatie tussen interactiesterkte en -lengte. Met het invoeren van $\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ de kinetische energie dispersie leidt dit tot:

$$\frac{m}{2\pi\hbar^2 a_s} = \frac{1}{g} + \sum_{\vec{k}'} \frac{1}{\varepsilon_{\vec{k}'}} \quad (2.15)$$

In de tweede term steekt een divergentie de kop op. Maar het zal blijken dat deze divergentie handig is om latere divergenties weg te werken door middel van renormalisatie, wat de rol zal zijn van deze term.

Hoofdstuk 3

Het klassieke ideale gas

Als eerste onderdeel van dit werk wordt in een klassiek ideaal gas onderzocht wat de gevolgen zijn van een relativistisch effect in het gas. Met een klassiek gas wordt bedoeld dat het een niet-kwantummechanisch systeem is. De deeltjes in het gas volgen de Boltzmannstatistiek.

Dat relativistische effecten belangrijk worden is al te zien in de Maxwell-Boltzmann verdeling voor de snelheden. Wanneer men in de verdeling de temperatuur laat toenemen dan worden er snelheden in het gas gevonden die groter zijn dan de snelheid van het licht in vacuüm wat duidelijk verboden is volgens de theorie van relativiteit.

Om dit effect tegen te gaan wordt er gezocht naar een verdeling voor de snelheden die hiermee rekening houdt. Eerst wordt de Maxwell-Boltzmannverdeling bekeken en vervolgens wordt dezelfde methode gevolgd met het verschil dat er vertrokken wordt van een relativistische energie dispersie. De verdeling die men dan bekomt wordt de Maxwell-Juttner verdeling genoemd [15].

3.1 Maxwell-Boltzmann

Om de Maxwell-Boltzmannverdeling voor de snelheden te bekomen wordt er vertrokken van de Boltzmannverdeling:

$$n(\varepsilon)d\varepsilon = Ag(\varepsilon)e^{-\varepsilon/k_B T} d\varepsilon \quad (3.1)$$

Hierin is $g(\varepsilon)$ de toestandsdichtheid. A is een normalisatie constante, de toestandssom. In het niet-relativistische geval is de toestandsdichtheid in drie dimensies evenredig met de vierkantswortel van de energie. Om tot de Maxwellverdeling te komen voor de snelheden, wordt de kinetische energie ingevuld in de Boltzmannverdeling:

$$\begin{aligned} \varepsilon &= \frac{mv^2}{2} \\ d\varepsilon &= mv dv \\ g(\varepsilon) &\sim \sqrt{\varepsilon} = \sqrt{\frac{m}{2}} v \\ \Rightarrow n(v)dv &= A \sqrt{\frac{m}{2}} mv^2 \exp\left\{\frac{-mv^2}{k_B T}\right\} dv \end{aligned}$$

De normalisatieconstante A wordt bepaald door te normeren op 1. Dit levert:

$$\begin{aligned}
 1 &= \int_0^\infty n(v)dv \\
 &= A \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2}} \int_0^\infty v^2 \exp\left\{\frac{-mv^2}{k_B T}\right\} dv \\
 \text{stel: } x^2 &= \frac{-mv^2}{k_B T} \Rightarrow 1 = A \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2}} \left(\frac{2k_B T}{m}\right)^{3/2} \underbrace{\int_0^\infty x^2 e^{-x^2} dx}_{\sqrt{\pi}/4} \\
 &\Rightarrow A = \sqrt{2} \frac{4}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{2k_B T}\right)^{3/2}
 \end{aligned}$$

Hiermee kan dus de Maxwell-Boltzmann distributie worden opgesteld zoals ze gekend is:

$$n(v)dv = \left(\frac{m}{2k_B T}\right)^{3/2} \frac{4}{\sqrt{\pi}} v^2 \exp\left\{-\frac{mv^2}{2k_B T}\right\} dv \quad (3.2)$$

Om deze later te vergelijken met de relativistische versie worden dimensieloze eenheden ingevoerd. De snelheid wordt in eenheden van de lichtsnelheid gezet en de temperatuur in eenheden van de rustmassaenergie:

$$\beta = \frac{v}{c} \quad (3.3)$$

$$\tau = \frac{k_B T}{mc^2} \quad (3.4)$$

Door deze eenheden in te voeren, krijgt de Maxwell-Boltzmann verdeling de volgende vorm:

$$n(\beta)d\beta = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{2\tau}\right)^{3/2} \beta^2 e^{-\frac{\beta^2}{2\tau}} d\beta \quad (3.5)$$

3.1.1 Relativistische temperaturen

Om een idee te hebben bij welke temperaturen er eigenlijk een relativistische beschrijving nodig is, wordt er bepaald bij welke temperatuur er bijvoorbeeld 5% van de deeltjes een snelheid heeft die groter is dan de lichtsnelheid.

De fractie van het aantal deeltjes met snelheid kleiner dan β gelijk aan 1 wordt berekend door de verdeling (3.5) te integreren van 0 tot 1. Dit levert de volgende formule op:

$$\begin{aligned}
 N_{0-1}(\tau) &= \int_0^1 n(\beta)d\beta \\
 &= \frac{4}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{2\tau}\right)^{3/2} \int_0^1 \beta^2 e^{-\frac{\beta^2}{2\tau}} d\beta \\
 &= \frac{4}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{2\tau}\right)^{3/2} \left(-\exp\left\{-\frac{1}{2\tau}\right\} \tau + \sqrt{\frac{\pi}{2}} \tau^{3/2} \text{Erf}\left\{\frac{1}{\sqrt{2\tau}}\right\}\right)
 \end{aligned}$$

Waarbij Erf de errorfunctie voorstelt.

Dit kan numeriek opgelost worden naar de temperatuur voor een aantal waarden. Voor verschillende waarden van $N_{1-\infty} = 1 - N_{0-1}$ kan een tabel opgemaakt

worden, tabel 3.1. Hierin staat welke temperatuur overeenkomt met een gegeven percentage van de deeltjes die een snelheid groter hebben dan de lichtsnelheid ($N_{1-\infty}$). Het is duidelijk dat dan relativistische correcties nodig zijn.

$N_{1-\infty}$	τ
0,05	0,13
0,1	0,16
0,25	0,24
0,5	0,42
0,75	0,82
0,9	1,71
0,95	2,84

Tabel 3.1: De temperatuur τ die overeenkomt met een bepaald aantal deeltjes die sneller gaan dan het licht.

Uit de tabel volgt dat bij een temperatuur van 0,16 keer de rustmassa, $k_B T = 0,16mc^2$, 10% van de deeltjes een snelheid heeft groter dan de snelheid van het licht in vacuum.

3.1.2 Gemiddelde snelheid

Een andere interessante grootte om naar te kijken is de gemiddelde snelheid die volgt uit de verdeling. Deze wordt gegeven door:

$$\begin{aligned} \langle \beta \rangle &= \int_0^\infty \beta n(\beta) d\beta \\ &= \frac{4}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{2\tau} \right)^{3/2} \int_0^\infty \beta^3 e^{-\frac{\beta^2}{2\tau}} d\beta \\ &= \frac{4}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{2\tau} \right)^{3/2} (2\tau)^2 \underbrace{\int_0^\infty x^{2 \cdot 2 - 1} e^{-x^2} dx}_{\Gamma(2)/2} \end{aligned}$$

De gemiddelde snelheid van de Maxwell-Boltzmann verdeling is na vereenvoudiging, cfr. [16]:

$$\langle \beta \rangle_{MB} = \sqrt{\frac{8\tau}{\pi}} \quad (3.6)$$

3.2 Relativistische snelheidsverdeling

Om de relativistische versie van de Maxwell-Boltzmann verdeling te bekomen wordt er vertrokken van de relativistische uitdrukking voor de kinetische energie:

$$\varepsilon = \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2} - mc^2 \quad (3.7)$$

Er is gecorrigeerd voor de rustmassa om ervoor te zorgen dat het nulpunt, $\varepsilon = 0$, overeenkomt met een impuls gelijk aan nul, $p = 0$.

Nu rest enkel nog de toestandsdichtheid te bekomen.

3.2.1 Relativistische toestandsdichtheid

Om de toestandsdichtheid te bekomen wordt eerst het aantal toestanden geteld in in de k -ruimte, dit wordt vervolgens omgezet naar een functie van de energie. Dit wordt aangeduid met $G(\varepsilon)$. Dan wordt daaruit het aantal toestanden gehaald in een schil met dikte $d\varepsilon$, dit is dan de toestandsdichtheid, $g(\varepsilon) = \frac{dG(\varepsilon)}{d\varepsilon}$. $G(\varepsilon)$ is enkel voor het positieve octant van de bol in de k -ruimte. Dit is dus gegeven door:

$$G = \frac{1}{8} \frac{4}{3} \pi k^3 \quad (3.8)$$

Om de straal in de k -ruimte te schrijven als een energie wordt de substitutie $p = \hbar k$ doorgevoerd in (3.7). Dit wordt dan omgerekend naar k .

$$\begin{aligned} \varepsilon &= \sqrt{m^2 c^4 + \hbar^2 k^2 c^2} - mc^2 \\ \Rightarrow (\varepsilon + mc^2)^2 &= m^2 c^4 + \hbar^2 k^2 c^2 \\ \Rightarrow \varepsilon^2 + 2\varepsilon mc^2 + m^2 c^4 &= m^2 c^4 + \hbar^2 k^2 c^2 \\ \Rightarrow \frac{\varepsilon(\varepsilon + 2mc^2)}{\hbar^2 c^2} &= k^2 \end{aligned}$$

Dit resultaat kan dan ingevuld worden in (3.8):

$$G(\varepsilon) = \frac{1}{8} \frac{4}{3} \pi \left(\frac{\varepsilon(\varepsilon + 2mc^2)}{\hbar^2 c^2} \right)^{3/2} \quad (3.9)$$

Hiermee kan dan de toestandsdichtheid bepaald worden door af te leiden naar de energie:

$$\begin{aligned} g(\varepsilon) &= \frac{dG(\varepsilon)}{d\varepsilon} \\ &= \frac{1}{8} \frac{4}{3} \frac{\pi}{\hbar^3 c^3} \frac{3}{2} (\varepsilon(\varepsilon + 2mc^2))^{1/2} (2\varepsilon + 2mc^2) \\ &= \frac{\pi}{2\hbar^3 c^3} (\varepsilon^2 + 2\varepsilon mc^2)^{1/2} (\varepsilon + mc^2) \end{aligned}$$

Dit resultaat wordt nu omgezet naar impulsen die dan later omgezet worden naar snelheden om zo tot een relativistische versie te worden van de Maxwell-Boltzmannverdeling (3.2). Eerst wordt een vereenvoudigde notatie ingevoerd voor de energie (3.7).

$$\varepsilon = \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2} - mc^2 = \epsilon - \epsilon_0$$

Met $\epsilon_0 = mc^2$ en ϵ de energie van het deeltje zonder te corrigeren voor de rustmassa, dan wordt $g(\varepsilon)$:

$$\begin{aligned} g(\epsilon) &= \frac{\pi}{2\hbar^3 c^3} (\epsilon^2 - 2\epsilon\epsilon_0 + \epsilon_0^2 + 2\epsilon\epsilon_0 - 2\epsilon_0^2)^{1/2} (\epsilon - \epsilon_0 + \epsilon_0) \\ &= \frac{\pi}{2\hbar^3 c^3} (\epsilon^2 - \epsilon_0^2)^{1/2} \epsilon \end{aligned} \quad (3.10)$$

Dit resultaat is dus de toestandsdichtheid voor een relativistische energie in drie dimensies. Deze zal in het volgende hoofdstuk nog gebruikt worden om de kritische temperatuur te berekenen voor het Bose-Einsteincondensaat met een relativistische dispersie.

3.2.2 Maxwell-Jüttner verdeling

Om de toestandsdichtheid (3.10) in te vullen in de Boltzmannverdeling en vervolgens om te zetten naar snelheden, is de relatie tussen impuls en snelheid nodig volgens de theorie van de relativiteit. Om over te gaan op een andere variabele is ook de differentiaal van de energie nodig.

Het eerste is gegeven door $p = m\gamma v$. Dit geeft in de energie: $\epsilon = \sqrt{m^2c^4 + c^2m^2\gamma^2v^2}$.

Vereenvoudigd krijgt men het volgende: $\epsilon = mc^2\sqrt{1 + \gamma^2\beta^2}$, waarbij $\beta = v/c$ en $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}$ is ingevoerd.

De differentiaal wordt dan gegeven door:

$$\begin{aligned}
 d\epsilon &= d\epsilon = mc^2 d\sqrt{1 + \gamma^2\beta^2} \\
 &= mc^2 \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{1 + \gamma^2\beta^2}} d(\gamma^2\beta^2) \\
 &= mc^2 \frac{\gamma\beta}{\sqrt{1 + \gamma^2\beta^2}} d(\gamma\beta) \\
 &= mc^2 \frac{\gamma\beta}{\sqrt{1 + \gamma^2\beta^2}} (\gamma d\beta + \beta d\gamma) \\
 &= mc^2 \frac{\gamma\beta}{\sqrt{1 + \gamma^2\beta^2}} (\gamma d\beta + \beta^2 \gamma^3 d\beta) \\
 &= mc^2 \frac{\gamma\beta}{\sqrt{1 + \gamma^2\beta^2}} \gamma^3 \left(\beta^2 + \underbrace{\frac{1}{\gamma^2}}_{1-\beta^2} \right) d\beta \\
 &= mc^2 \frac{\gamma\beta}{\sqrt{1 + \gamma^2\beta^2}} \gamma^3 d\beta
 \end{aligned}$$

Dit alles invullen in de Boltzmannverdeling en omzetten naar vormen met β en γ levert, met de constanten mee in de normalisatie constante:

$$\begin{aligned}
 n(\beta)d\beta &= A \left(\sqrt{1 + \gamma^2\beta^2} - 1 \right)^{1/2} \sqrt{1 + \gamma^2\beta^2} \frac{\gamma\beta}{\sqrt{1 + \gamma^2\beta^2}} \gamma^3 \\
 &\quad \times \exp \left\{ -\frac{mc^2}{k_B T} \left(\sqrt{1 + \gamma^2\beta^2} - 1 \right) \right\} d\beta \\
 &= A \gamma^5 \beta^2 \exp \left\{ -\frac{mc^2}{k_B T} \left(\sqrt{1 + \gamma^2\beta^2} - 1 \right) \right\} d\beta \quad (3.11)
 \end{aligned}$$

Om te normeren moet er nu enkel geïntegreerd worden van 0 tot 1, want β kan niet groter worden dan 1. Er wordt opnieuw een dimensieloze parameter ingevoerd die de temperatuur voorstelt in eenheden van rustenergie: $\tau = \frac{k_B T}{mc^2}$. Dit levert de volgende normalisatie:

$$\begin{aligned}
 1 &= \int_0^1 A \gamma^5 \beta^2 \exp \left\{ -\frac{1}{\tau} \left(\sqrt{1 + \gamma^2\beta^2} - 1 \right) \right\} d\beta \\
 &= A \int_0^\infty (\gamma\beta)^2 \exp \left\{ -\frac{1}{\tau} \left(\sqrt{1 + \gamma^2\beta^2} - 1 \right) \right\} d(\gamma\beta) \\
 &= A e^{1/\tau} \int_0^\infty x^2 e^{-\sqrt{1+x^2}/\tau} dx
 \end{aligned}$$

Voor de overgebleven integraal wordt een integraalformule gebruikt van de gemodificeerde Hankelfuncties:

$$\int_0^\infty t^2 e^{-z\sqrt{1+t^2}} dt = \frac{1}{4} (K_3(z) - K_1(z)) = \frac{1}{z} K_2(z) \quad (3.12)$$

Wanneer dit vergeleken wordt met de eerder gevonden integraal is te zien dat $z = \frac{1}{\tau}$, dit levert dus voor de normalisatie constante:

$$A = \frac{1}{\tau e^{1/\tau} K_2\left(\frac{1}{\tau}\right)} \quad (3.13)$$

Dit invullen in (3.11) levert de zogenaamde Maxwell-Juttnerverdeling [15], dewelke een veralgemening is van de gewone Maxwellverdeling.

$$n(\beta)d\beta = \frac{1}{\tau e^{1/\tau} K_2\left(\frac{1}{\tau}\right)} \beta^2 \gamma^5 \exp\left\{-\frac{1}{\tau} \left(\sqrt{1+\beta^2\gamma^2} - 1\right)\right\} d\beta \quad (3.14)$$

Dit wordt soms gegeven als functie van γ . Dit is makkelijk in te zien door te beseffen dat $d\gamma = \beta\gamma^3 d\beta$ en $\sqrt{1+\gamma^2\beta^2} = \gamma\sqrt{1/\gamma^2 + \beta^2} = \gamma$:

$$n(\gamma)d\gamma = \frac{1}{\tau e^{1/\tau} K_2\left(\frac{1}{\tau}\right)} \beta\gamma^2 \exp\left\{-\frac{1}{\tau} (\gamma - 1)\right\} d\gamma \quad (3.15)$$

3.2.3 Gemiddelde snelheid

Ook hier kan de gemiddelde snelheid berekend worden. Deze kan dan vergeleken worden met de gemiddelde snelheid van de Maxwell-Boltzmannverdeling. Om deze te berekenen is het aangewezen om dit via formule (3.15) in functie van γ te doen. Om het gemiddelde te berekenen moet er geïntegreerd worden over het domein. Omdat β tussen 0 en 1 loopt, ligt γ tussen 1 en oneindig. Er zal dus geïntegreerd worden tussen 1 en ∞ .

$$\begin{aligned} \langle\beta\rangle &= \int_1^\infty \beta n(\gamma) d\gamma \\ &= \frac{1}{\tau e^{1/\tau} K_2\left(\frac{1}{\tau}\right)} \int_1^\infty \beta^2 \gamma^2 \exp\left\{-\frac{1}{\tau} (\gamma - 1)\right\} d\gamma \\ &= \frac{1}{\tau K_2\left(\frac{1}{\tau}\right)} \int_1^\infty \left(1 - \frac{1}{\gamma^2}\right) \gamma^2 e^{-\frac{\gamma}{\tau}} d\gamma \\ &= \frac{1}{\tau K_2\left(\frac{1}{\tau}\right)} \left(\int_1^\infty \gamma^2 e^{-\frac{\gamma}{\tau}} d\gamma - \int_1^\infty e^{-\frac{\gamma}{\tau}} d\gamma\right) \\ &= \frac{1}{\tau K_2\left(\frac{1}{\tau}\right)} \left(\tau^3 \int_{1/\tau}^\infty x^2 e^{-x} dx - \tau \int_{1/\tau}^\infty e^{-x} dx\right) \\ &= \frac{1}{\tau K_2\left(\frac{1}{\tau}\right)} \left(\tau^3 \left(-x^2 e^{-x}\Big|_{1/\tau}^\infty + \int_{1/\tau}^\infty 2xe^{-x} dx\right) - \tau e^{-1/\tau}\right) \\ &= \frac{1}{\tau K_2\left(\frac{1}{\tau}\right)} \left(\tau^3 \left(\frac{1}{\tau^2} e^{-1/\tau} + 2\frac{1}{\tau} e^{-1/\tau} + 2e^{-1/\tau}\right) - \tau e^{-1/\tau}\right) \\ &= \frac{e^{-1/\tau}}{\tau K_2\left(\frac{1}{\tau}\right)} (\tau + 2\tau^2 + 2\tau^3 - \tau) \end{aligned}$$

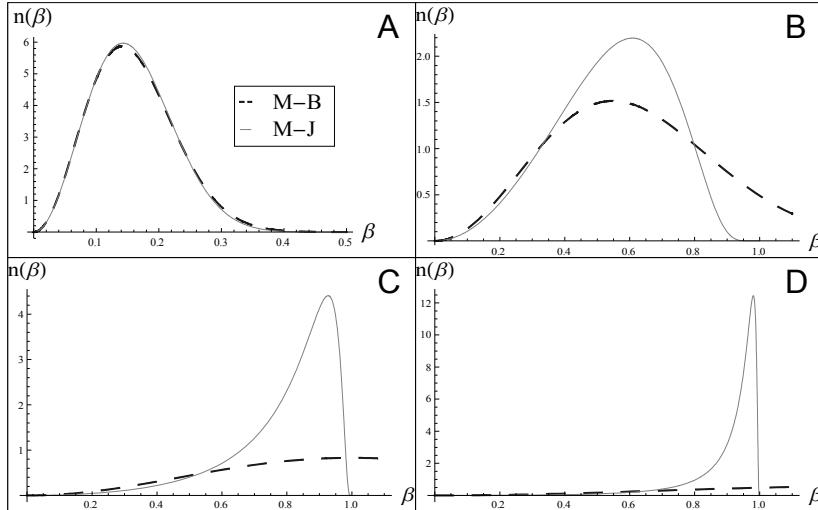
De gemiddelde snelheid die volgt uit de relativistische verdeling wordt gegeven door:

$$\langle \beta \rangle_{MJ} = \frac{2}{e^{1/\tau} K_2\left(\frac{1}{\tau}\right)} (\tau^2 + \tau) \quad (3.16)$$

3.3 Vergelijking tussen klassiek en relativistisch

In deze sectie wordt de vergelijking tussen de twee verdelingen gemaakt. Aan de uitdrukking voor τ is te al te zien dat voor lage temperatuur de klassieke limiet inderdaad bereikt wordt. Want $\tau \rightarrow 0$ kan zowel door $T \rightarrow 0$ of $mc^2 \rightarrow \infty$, dit laatste is de klassieke limiet in de relativiteit.

Dit is ook te zien op de plots van deze functies van de verdelingen. Deze zijn geplot in figuur (3.1).



Figuur 3.1: Vergelijking tussen de klassieke verdeling (M-B) en de relativistische verdeling (M-J) voor verschillende waarden van τ . A: $\tau = 0,01$, B: $\tau = 0,15$, C: $\tau = 0,5$, D: $\tau = 1$.

Als er gekeken wordt naar lage snelheden, dan valt op dat de beide verdelingen op dezelfde manier naar nul gaan. Dit kan geverifieerd worden door de expansie van beide verdelingen rond nul te vergelijken. Dit kan gedaan worden voor willekeurige temperaturen. Voor de klassieke verdeling geeft dit een

kwadratische afhankelijkheid, want de eerste afgeleide naar β is nul:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial n(\beta)}{\partial \beta} \right|_{\beta=0} &= \frac{4}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{2\tau} \right)^{3/2} \left(2\beta e^{-\beta^2/2\tau} - \frac{\beta^3}{\tau} e^{-\beta^2/2\tau} \right) \Big|_{\beta=0} = 0 \\ \left. \frac{\partial^2 n(\beta)}{\partial \beta^2} \right|_{\beta=0} &= \frac{4}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{2\tau} \right)^{3/2} \left(2e^{-\beta^2/2\tau} - \frac{2\beta^2}{\tau} e^{-\beta^2/2\tau} \right. \\ &\quad \left. - 3\frac{\beta^2}{\tau} e^{-\beta^2/2\tau} + \frac{\beta^4}{\tau^2} e^{-\beta^2/2\tau} \right) \Big|_{\beta=0} = \frac{8}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{2\tau} \right)^{3/2} \end{aligned}$$

Dit leidt dus tot:

$$\Rightarrow n(\beta \rightarrow 0) \approx \frac{8}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{2\tau} \right)^{3/2} \beta^2 + \mathcal{O}[\beta^3] \quad (3.17)$$

Ook bij de relativistische verdeling is de laagste orde term die niet nul is, de tweede orde term. In dit geval is die gelijk aan:

$$n(\beta \rightarrow 0) \approx \frac{1}{\tau e^{1/\tau} K_2\left(\frac{1}{\tau}\right)} \beta^2 + \mathcal{O}[\beta^3]$$

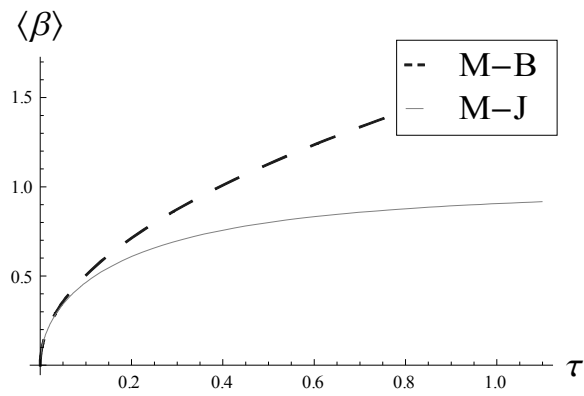
Voor lage snelheden vertonen beide dus hetzelfde gedrag, ze gaan kwadratisch naar nul.

Als het gemiddelde wordt bestudeerd is te merken dat ook hier voor lage temperatuur de beide verdelingen samenvallen. Door de expansie in een reeks rond nul van de relativistische uitdrukking te bekijken valt meteen op dat dit de niet-relativistische uitdrukking (3.6) geeft. De serie expansie van (3.16) is als volgt gegeven:

$$\sqrt{\frac{8}{\pi}} \tau^{1/2} - \frac{7}{\sqrt{8\pi}} \tau^{3/2} + \mathcal{O}[\tau^{5/2}] \quad (3.18)$$

De laagste orde term komt inderdaad overeen met het gemiddelde van de klassieke verdeling (3.6).

Op figuur 3.2 valt duidelijk op dat bij lage temperatuur de twee curven samenvallen. Het is ook duidelijk dat het gemiddelde van de Maxwell-Juttnerverdeling asymptotisch naar 1 gaat.



Figuur 3.2: De gemiddelde snelheid in functie van de temperatuur voor het klassiek (M-B) en het relativistisch geval (M-J)

Hoofdstuk 4

Bose Einstein condensatie

In dit hoofdstuk wordt de invloed van een relativistische dispersie op de kritische temperatuur van een Bose-Einstein Condensaat (BEC) bestudeerd.

Om dit te berekenen wordt het aantal deeltjes berekend dat in de grondtoestand zit aan de hand van de toestandsdichtheid. In het vorige hoofdstuk, sectie 3.2.1, werd de toestandsdichtheid berekend in het relativistische geval. Dit wordt dan samen met de Bose-Einsteinverdeling gebruikt om het aantal deeltjes af te schatten dat in een geëxciteerde toestand zit.

Een Bose-Einsteincondensaat ontstaat doordat een groot aantal deeltjes in de grondtoestand zitten. Door het aantal beschikbare geëxciteerde toestanden als functie van de temperatuur af te schatten kan gevonden worden bij welke temperatuur het aantal van deze beschikbare toestanden gelijk wordt aan het aantal deeltjes. Vanaf deze temperatuur zullen dus meer deeltjes in de grondtoestand terecht komen. Dit is dan de definitie van de kritische temperatuur voor het Bose-Einstein condensaat [?].

In een gas van Bosonen volgen de deeltjes niet meer de verdelingsfunctie van Boltzmann. Ze zullen de Bose-Einsteinverdeling volgen. Deze verdeling geeft de kans dat een toestand met energie ε bezet is bij temperatuur T . De Bose-Einsteinverdeling is als volgt [17].

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{\exp\left\{\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}\right\} - 1} \quad (4.1)$$

Het aantal deeltjes dat in een geëxciteerde toestand zit is dan gegeven door de integraal te nemen over de toestandsdichtheid, $g(\varepsilon)$ met als gewicht de Bose-Einsteinverdeling (4.1). Deze integraal wordt dan genomen over alle toestanden buiten de grondtoestand. Dit is in formulevorm:

$$N_{exc} = \int_{\varepsilon_0}^{\infty} g(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon \quad (4.2)$$

Om dit te gebruiken moet de chemische potentiaal, μ , bekend zijn. Door de bezetting van de grondtoestand te bekijken kan een uitdrukking voor de chemische potentiaal bekomen worden. De bezetting N_0 van de grondtoestand, ε_0 , is gegeven door:

$$N_0 = \frac{1}{\exp\left\{(\varepsilon_0 - \mu)/k_B T\right\} - 1} \quad (4.3)$$

Als er wordt gekeken naar de situatie bij lage temperatuur dan wordt deze bezetting groot en wordt de exponent ongeveer gelijk aan 1. De exponent kan dan geëxpandeerd worden, dit geeft:

$$N_0 \approx \frac{1}{1 + (\epsilon_0 - \mu)/k_B T - 1} \quad (4.4)$$

$$\Rightarrow \mu \approx \epsilon_0 - \frac{k_B T}{N_0} \quad (4.5)$$

Deze chemische potentiaal kan dan gebruikt worden om de bezetting te beschrijven van de andere energieniveaus. Bij lage temperatuur of wanneer er veel deeltjes in het condensaat zijn, zal de chemische potentiaal naar de energie van de eendeeltjesgrondtoestand gaan. Ingevuld in de Bose-Einstein verdeling geeft dit:

$$\begin{aligned} f(\epsilon) &= \frac{1}{\exp\{(\epsilon - \epsilon_0)/k_B T\} \exp\{1/N_0\} - 1} \\ &\approx \frac{1}{\exp\{(\epsilon - \epsilon_0)/k_B T\} - 1} \end{aligned} \quad (4.6)$$

Waarbij gebruik gemaakt is van het feit dat de bezetting van de grondtoestand groot is en dit leidt tot een exponent die ongeveer 1 is.

4.1 Niet-relativistische toestandsdichtheid

Eerst wordt het resultaat van een niet-relativistische toestandsdichtheid gegeven. Deze toestandsdichtheid is als volgt:

$$g(\epsilon) = \frac{\pi m V}{2\hbar^3} \sqrt{2m\epsilon} \quad (4.7)$$

Dit kan ingevuld worden in de formule (4.2) van het aantal beschikbare geëxciteerde toestanden, (4.2). Waarbij de grondtoestandsenergie gelijk is aan nul, dit leidt tot:

$$\begin{aligned} N_{exc} &= \frac{\pi m V}{2\hbar^3} \int_0^\infty \frac{\sqrt{2m\epsilon}}{e^{\epsilon/k_B T} - 1} d\epsilon \\ &= \left(\frac{\pi m k_B T}{2\hbar^2} \right)^{3/2} V \frac{2}{\sqrt{\pi}} \underbrace{\int_0^\infty \frac{\sqrt{x}}{e^x - 1} dx}_{\zeta(3/2)\Gamma(3/2)} \end{aligned}$$

Waarbij de integraal is omgezet naar de gammafunctie Γ en de Riemann zeta-functie ζ .

Als hierin dan het aantal deeltjes gelijk wordt gesteld aan het aantal geëxciteerde toestanden dan vindt men de kritische temperatuur.

Dit leidt tot de volgende relatie tussen dichtheid en temperatuur:

$$\frac{N}{V} = 2,612 \left(\frac{\pi m k_B T_c}{2\hbar^2} \right)^{3/2} \quad (4.8)$$

Dit kan in een andere vorm geschreven worden om later te vergelijken met het relativistische resultaat:

$$\frac{N}{V} = 2,612 \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3/2} \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^3 \left(\frac{k_B T_c}{mc^2}\right)^{3/2} \quad (4.9)$$

Waarin de dimensieloze temperatuur in wordt herkend, $\tau_c = \frac{k_B T_c}{mc^2}$ en de Comptongolflengte, $\lambda_C = \frac{\hbar}{mc}$. De Comptongolflengte is de lengteschaal waarop relativistische effecten belangrijk worden. Hier is een Comptonvolume te onderscheiden: λ_C^3 .

4.2 Relativistische toestandsdichtheid

De toestandsdichtheid is gegeven door uitdrukking (3.10):

$$g(\epsilon) = \frac{V\pi}{2\hbar^3 c^3} \epsilon \sqrt{\epsilon^2 - \epsilon_0^2} \quad (4.10)$$

Het aantal geëxciteerde toestanden kan bekomen worden door de integraal te nemen over toestandsdichtheid vermenigvuldigd met de Bose-Einsteinverdeling. Door deze vorm van de toestandsdichtheid te nemen moet er geïntegreerd worden vanaf $\epsilon_0 = mc^2$ tot oneindig. Dit is omdat $\epsilon = \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2}$ en er dus altijd een rust energie is. Hierdoor moet deze in rekening gebracht worden als chemische potentiaal in de Bose-Einsteinverdeling.

$$\begin{aligned} N_{exc} &= \int_{\epsilon_0}^{\infty} g(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon \\ &= \frac{V\pi}{2\hbar^3 c^3} \int_{\epsilon_0}^{\infty} \frac{\epsilon \sqrt{\epsilon^2 - \epsilon_0^2}}{\exp\{(\epsilon - \epsilon_0)/k_B T\} - 1} d\epsilon \end{aligned} \quad (4.11)$$

Nu wordt de energie in eenheden gezet van de rustenergie, ϵ_0 . De volgende transformatie wordt dus toegepast: $\epsilon \rightarrow \frac{\epsilon}{\epsilon_0}$. De temperatuur wordt ook in rustenergie-eenheden gezet, $\tau = \frac{k_B T}{mc^2}$. Er komt dus voor het aantal geëxciteerde toestanden:

$$\begin{aligned} N_{exc} &= \frac{V\pi}{2\hbar^3 c^3} \epsilon_0^3 \int_1^{\infty} \frac{\epsilon \sqrt{\epsilon^2 - 1}}{e^{(\epsilon-1)/\tau} - 1} d\epsilon \\ &= \frac{V\pi}{2\hbar^3 c^3} \epsilon_0^3 \int_1^{\infty} \frac{\epsilon \sqrt{\epsilon^2 - 1} e^{-(\epsilon-1)/\tau}}{1 - e^{-(\epsilon-1)/\tau}} d\epsilon \end{aligned}$$

Nu wordt gebruikgemaakt van de reeksontwikkeling voor $\frac{1}{1-x} = \sum_{n=0}^{\infty} x^n$. In dit geval staat er dus:

$$\frac{1}{1 - e^{-(\epsilon-1)/\tau}} = \sum_{n=0}^{\infty} \left(e^{-(\epsilon-1)/\tau} \right)^n$$

Dit kan vervolgens ingevuld worden en met de substitutie $x = \epsilon/\tau$ geeft dit:

$$\begin{aligned} N_{exc} &= \frac{V\pi}{2\hbar^3 c^3} \epsilon_0^3 \tau^3 \sum_{n=0}^{\infty} e^{(n+1)/\tau} \int_{1/\tau}^{\infty} x \sqrt{x^2 - \frac{1}{\tau^2}} e^{-(n+1)x} dx \\ &= \frac{V\pi}{2\hbar^3 c^3} \epsilon_0^3 \tau^3 \sum_{n=1}^{\infty} e^{n/\tau} \int_{1/\tau}^{\infty} x \sqrt{x^2 - \frac{1}{\tau^2}} e^{-nx} dx \end{aligned}$$

Hierop kan de volgende transformatie worden op toegepast: $z^2 = (nx)^2 - \left(\frac{n}{\tau}\right)^2$. Dit leidt tot de volgende gelijkheden:

$$\begin{aligned} x dx &= \frac{1}{n^2} z dz \\ nx &= \sqrt{z^2 + \left(\frac{n}{\tau}\right)^2} = \frac{n}{\tau} \sqrt{\left(\frac{z\tau}{n}\right)^2 + 1} \\ \sqrt{(xn)^2 - \left(\frac{n}{\tau}\right)^2} &= z \\ x = 1/\tau &\Rightarrow z = 0 \end{aligned}$$

Hiermee kan de integraal geschreven worden als een bekende integraalformule (3.12):

$$\begin{aligned} N_{exc} &= \frac{V\pi}{2\hbar^3 c^3} \epsilon_0^3 \sum_{n=1}^{\infty} e^{n/\tau} \int_0^{\infty} \left(\frac{z\tau}{n}\right)^2 \exp\left\{\frac{n}{\tau} \sqrt{\left(\frac{z\tau}{n}\right)^2 + 1}\right\} d\left(\frac{z\tau}{n}\right) \\ &= \frac{V\pi}{2\hbar^3 c^3} \epsilon_0^3 \sum_{n=1}^{\infty} e^{n/\tau} \left(\frac{\tau}{n}\right) K_2\left(\frac{n}{\tau}\right) \\ &= \frac{V\pi}{2\hbar^3 c^3} (mc^2)^3 \sum_{n=1}^{\infty} e^{n/\tau} \left(\frac{\tau}{n}\right) K_2\left(\frac{n}{\tau}\right) \\ &= \frac{V\pi}{2} \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^3 \sum_{n=1}^{\infty} e^{n/\tau} \left(\frac{\tau}{n}\right) K_2\left(\frac{n}{\tau}\right) \end{aligned}$$

De kritische temperatuur waarop een Bose-Einstein condensaat wordt gevormd, is gegeven door te eisen dat het aantal geëxciteerde toestanden overeenkomt met het aantal deeltjes. Er wordt dus $N = N_{exc}$ gesteld.

Dit leidt dan tot de volgende relatie tussen dichtheid en temperatuur:

$$\frac{N}{V} = \frac{\pi}{2} \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^3 \sum_{n=1}^{\infty} e^{n/\tau_c} \left(\frac{\tau_c}{n}\right) K_2\left(\frac{n}{\tau_c}\right) \quad (4.12)$$

Deze reeks convergeert want de verhouding van de opeenvolgende termen is kleiner dan 1.

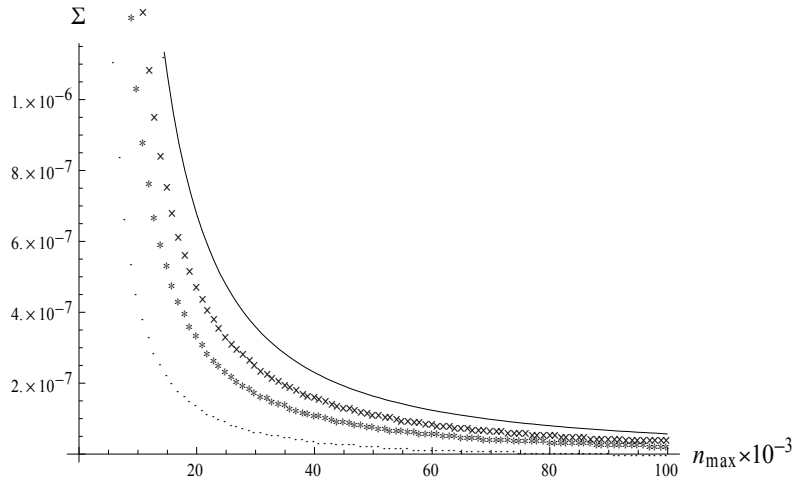
$$\frac{\left|e^{n/\tau_c} \left(\frac{\tau_c}{n}\right) K_2\left(\frac{n}{\tau_c}\right)\right|}{\left|e^{(n-1)/\tau_c} \left(\frac{\tau_c}{n-1}\right) K_2\left(\frac{n-1}{\tau_c}\right)\right|} = e^{-1/\tau_c} \frac{n-1}{n} \frac{K_2\left(\frac{n}{\tau_c}\right)}{K_2\left(\frac{n-1}{\tau_c}\right)} \quad (4.13)$$

Hierin is e^{-1/τ_c} altijd kleiner dan 1 omdat τ_c positief is. $(n-1)/n$ is ook altijd kleiner dan 1 voor $n \in \mathbb{N}_0$. En de verhouding van de Hankelfuncties id ook altijd kleiner dan 1 omdat het gaat om een strik dalende functie.

Er zal nu worden onderzocht tot hoever de reeks moet berekend worden om een nauwkeurig resultaat te bekomen. Om dit te doen is de functie Σ bekeken. Σ het verschil tussen de reeks afgebroken op n_{max} en $n_{max} - 1$, dit als functie van de temperatuur, τ .

$$\Sigma(\tau, n) = e^{n/\tau} \left(\frac{\tau}{n}\right) K_2\left(\frac{n}{\tau_c}\right) \quad (4.14)$$

Er kan dan onderzocht worden of het convergeert voor verschillende waarden van τ . Dit is gebeurd en geplot in figuur (4.1).



Figuur 4.1: Σ als functie van n_{max} om de convergentie te onderzoeken. Dit voor verschillende waarden van τ : 0,1 (.); 0,5 (+); 1 (*); 5 (\times); 10 (volle lijn)

Op de figuur is te zien dat vanaf n_{max} ongeveer 50000 er niet veel verbetert. Als een precisie gewent is van 10^{-6} is het voldoende om 25000 termen mee te nemen.

Om de dichtheid uit te zetten ten opzichte van de kritische temperatuur moet dus de reeks uitgewerkt worden. Omdat dit niet analytisch kan, dient dit numeriek te gebeuren. Het is echter aangewezen om de integraal (4.11) numeriek uit te werken omdat dit minder rekenintensief is.

4.2.1 Extreem relativistisch regime

Op figuur 4.2 valt op dat na het afbuigen er terug een machtwet wordt gevolgd. Dit is omdat in het extreem relativistische regime de kritische temperatuur schaalt als een machtwet. Dit is af te leiden door in de algemene uitdrukking

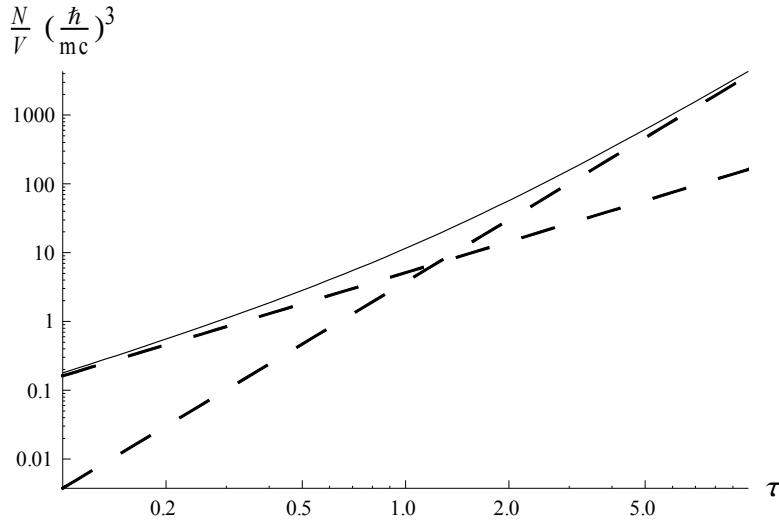
(4.11) voor het aantal geëxciteerde toestanden de rustmassaenergie ϵ_0 naar nul te brengen. Zo komt er:

$$\begin{aligned} N_{exc} &= \frac{V\pi}{2\hbar^3 c^3} \int_0^\infty \frac{\epsilon^2}{\exp\{\epsilon/k_B T\} - 1} d\epsilon \\ &= \frac{V\pi}{2} \left(\frac{k_B T}{\hbar^3 c^3} \right)^3 \underbrace{\int_0^\infty \frac{x^2}{e^x - 1}}_{\Gamma(3)\zeta(3)} \end{aligned} \quad (4.15)$$

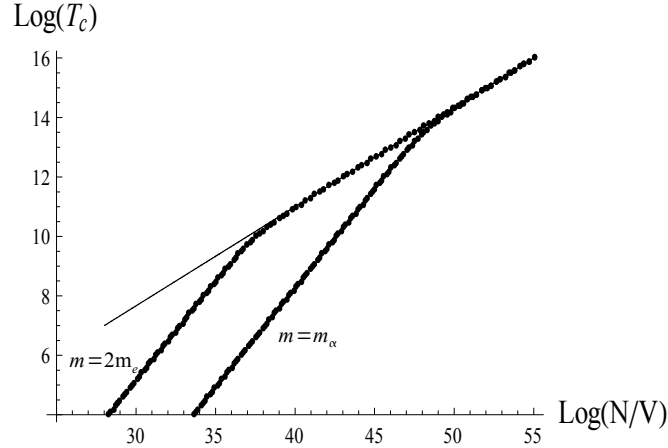
Hierin is gebruik gemaakt van een integraalidentiteit die de integraal relateert met de gamma functie en de Riemann-zetafunctie. Als hier wordt overgegaan op de dimensieloze variabelen τ dan vindt men:

$$\frac{N_{exc}}{V} = \frac{\pi}{2} \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^3 \tau^3 \quad (4.16)$$

Deze uitdrukking is onafhankelijk van de massa. De massa is hier terug erin gebracht om te kunnen vergelijken met de vorige resultaten. Het is duidelijk een machtwet. Om aan te tonen dat het inderdaad onafhankelijk van de massa is, wordt er vergeleken tussen de curve voor twee verschillende massa's, figuur 4.3. Er is gekozen voor 2 keer de elektron massa en de massa van een helium kern, α -deeltjes. Op de figuur is duidelijk te zien dat bij hoge dichtheden de kritische temperatuur niet meer afhangt van de massa van de deeltjes.



Figuur 4.2: De relatie tussen de kritische temperatuur en de dichtheid van een BEC. De volle lijn is het relativistische resultaat, uitdrukking (4.9). De stippellijnen zijn het niet-relativistische resultaat, uitdrukking (4.12) en het extreem relativistische resultaat, uitdrukking (4.16).



Figuur 4.3: De kritische temperatuur T_c staat in Kelvin en is getoond op een tiendelige logaritmische schaal als functie van de dichtheid die analoog op een tiendelige logaritmische schaal staat in m^{-3} . Dit voor twee verschillende massa's: $2m_e$ en m_α . De volle lijn is de extreem relativistische uitdrukking (4.16).

De relatie tussen dichtheid en kritische temperatuur is gegeven door een machtswet, zie formule (4.9), daarom is het interessant om de relatie uit te zetten op een logaritmische schaal. Dit is gebeurd in figuur 4.2.

Op deze figuur is te zien dat bij hoge dichtheden de kritische temperatuur afwijkt van de resultaten gevonden met de niet-relativistische toestandsdichtheid. Dit gebeurt vanaf $\tau \approx 0.1$ wat overeenkomt met $T = 0.1mc^2/k_B$. De dichtheid die met deze temperatuur correspondeert is dan $N/V(\hbar/mc)^3 \approx 1$ waaruit volgt: $N/V \approx (mc/\hbar)^3$. Dit is net het volume dat gegeven wordt door de Comptonschaal, $\lambda_C = mc/\hbar$

Deze resultaten komen overeen met resultaten die ook in de literatuur worden gevonden [18].

Er zijn een paar belangrijke lengteschalen te ontwaren: de golflengte van de Broglie en de Comptongolflengte. Wanneer de afstand tussen de deeltjes kleiner wordt dan de golflengte van de Broglie, worden de kwantummechanische effecten belangrijk en kan het gas Bose-Einstein condenseren. Wanneer de deeltjes dichter bij elkaar zijn dan de Comptongolflengte, dan zijn de relativistische correcties belangrijk. De golflengte van de Broglie wordt mee bepaald door de temperatuur, maar de Comptongolflengte hangt naast enkele universele constanten enkel af van de massa van de deeltjes. Wanneer de golflengte van de Broglie vergelijkbaar wordt met de Comptongolflengte, dan zal er een relativistisch condensaat gevormd worden, zoals hierboven beschreven.

Deze hoge temperaturen en dichtheden zijn niet na te bootsen in het laboratorium. In sterren daarentegen zijn deze ordes van temperaturen en dichtheden mogelijk terug te vinden.

Om een idee te hebben over welke ordes het hier gaat, kan een neutronen-gas bekeken worden. Hiervoor is de massa van het neutron nodig, $m_n = 1.674 \times 10^{-27} \text{ kg}$. Dit leidt tot een temperatuur van $1.07 \times 10^{12} \text{ K}$ waarvoor afwijkingen worden verwacht. De dichtheid die het gas dan zou moeten hebben is $1.03 \times 10^{47} \text{ m}^{-3}$. Dit kan vergeleken worden met de typische waarden van neutronensterren, [19]. De temperatuur van een neutronenster is van de orde van 10^{12} K vlak na het ontstaan. De dichtheid is van de orde van 10^{17} kg/m^3 , of in neutronen per volume: 10^{44} m^{-3} . Er kan dus besloten worden dat zelfs in sterren de dichtheden nog niet groot genoeg zijn om relativistische effecten te zien in de kritische temperatuur.

Wel zal er door de grote dichtheid er toch een (niet-relativistisch) condensaat kunnen zijn in de neutronensterren. Dit kan belangrijk zijn in pulsars, dit zijn snel roterende neutronensterren. In pulsars is ontdekt dat er glitches voorkomen in de rotaties van de ster, er is een verspringing in de rotatiecurve. Een van de theorieën die dit probeert te verklaren gaat uit van vortices in een condensaat die loskomen van een rooster. Dit gaat gepaard met een energiesprong wat te zien zou zijn als een glitch in de rotatie.

Hoofdstuk 5

Interagerend Fermigas

Dit hoofdstuk handelt over het Fermigas waar een interactie aan toegevoegd wordt in de vorm zoals voorgesteld door Bardeen-Cooper-Schrieffer om supergeleiding te verklaren.

Bardeen-Cooper-Schrieffer trachtten supergeleiding te verklaren door te stellen dat elektronen zich binden in Cooper paren. Deze Cooper paren komen tot stand door een aantrekkende interactie. Vermits de elektronen elkaar afstoten door Coulomb interactie is er een ander mechanisme nodig. Dit komt er in de vorm van uitwisseling van fononen, oftewel roostertrillingen. Deze uitwisseling kan ervoor zorgen dat de netto interactie aantrekkend is.

Omdat de elektronen bij supergeleiding interageren door fononuitwisseling is de impulsuitwisseling tussen de elektronen beperkt tot een schil van dikte k_{Debye} rond het fermi niveau, dit is omdat k_{Debye} de maximale impuls is van het fonon. Dit is beperkt rond het Fermi-niveau omdat elektronen die dieper in de Fermi-sfeer zitten kunnen niet geëxciteerd worden tot buiten de sfeer. Deze elektronen nemen niet deel aan de interactie en zijn dus verder van weinig belang.

Wanneer er gekeken wordt naar een fermi gas van atomen dan is die beperking niet meer geldig. Want in dit geval zijn het botsingen tussen de atomen die de interactie tot stand brengen. Deze interactie wordt meestal voorgesteld door een harde bol verstrooiing.

Door deze harde bol verstrooiing in te voeren zal er blijken dat een divergentie is ingevoerd. Deze divergentie komt er door het feit er nu niet beperkt wordt tot een schil rond de fermisfeer. Doordat deze beperking niet meer geldt zal er dus geïntegreerd worden over k van 0 tot ∞ . En het is de limiet $k \rightarrow \infty$ die voor problemen kan zorgen. Er zijn twee manieren om dit op te lossen. Enerzijds kan men een cut-off invoeren, zoals bij supergeleiding. Typisch wordt hiervoor de Van Der Waals cut-off voor gebruikt. Een andere manier is om te renormaliseren.

5.1 BCS-Hamiltoniaan

De Hamiltoniaan zoals voorgesteld door Bardeen-Cooper-Schrieffer kan gebruikt worden om een Fermi gas met interacties te bestuderen. Deze Hamiltoniaan is

gegeven door [6, 7]:

$$\hat{H}_{BCS} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} - g \sum_{k' \in \mathcal{D}} \sum_{k \in \mathcal{D}} \hat{c}_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}', \downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}', \uparrow} \quad (5.1)$$

Deze Hamiltoniaan is geschreven in het formalisme van tweede kwantisatie. Er wordt gebruik gemaakt van de creatie en annihilatie operatoren voor een fermion in een toestand \mathbf{k} met spin op of neer, \hat{c}^{\dagger} en \hat{c} respectievelijk. De interactie tussen de fermionen wordt voorgesteld door de interactiesterkte g . \mathcal{D} is de verzameling van k -vectoren in een schil rond de Fermisfeer. $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ is de kinetische energie dispersie van de deeltjes, om het relativistische effect te bestuderen is deze gegeven door:

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \sqrt{m^2 c^4 + \hbar^2 k^2 c^2} \quad (5.2)$$

De Hamiltoniaan wordt vervolgens benaderd door een mean field beschrijving. Hierbij kan het product van vier creatie en annihilatie operatoren omgezet worden naar een som van paren van operatoren met daarbij de verwachtingswaarden van de andere:

$$\begin{aligned} & \sum_{k \in \mathcal{D}} \sum_{k' \in \mathcal{D}} \hat{c}_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}', \downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}', \uparrow} \approx \\ & \sum_{k \in \mathcal{D}} \sum_{k' \in \mathcal{D}} \left(\langle \hat{c}_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} \rangle \hat{c}_{-\mathbf{k}', \downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}', \uparrow} + \hat{c}_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} \langle \hat{c}_{-\mathbf{k}', \downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}', \uparrow} \rangle \right. \\ & \quad \left. - \langle \hat{c}_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} \rangle \langle \hat{c}_{-\mathbf{k}', \downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}', \uparrow} \rangle \right) \end{aligned}$$

Door de operatoren op deze manier samen te nemen wordt de paarvorming heel duidelijk bewaard. De operator $\sum_{k \in \mathcal{D}} \hat{c}_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger}$ kan namelijk gezien worden als de creatie operator van het paar en dan wordt $\sum_{k \in \mathcal{D}} \langle \hat{c}_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} \rangle$ de dichtheid aan paren. Bij het BEC is deze verwachtingswaarde ongeveer gelijk aan de wortel van het aantal gecondenseerde deeltjes. Dit kan dus geschreven worden als een parameter, om de notatie te vereenvoudigen wordt de interactie sterkte hier mee vermenigvuldigd om zo tot een parameter Δ te komen:

$$\Delta = -g \sum_{k \in \mathcal{D}} \langle \hat{c}_{-\mathbf{k}, \downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}, \uparrow} \rangle \quad (5.3)$$

Hiermee kan de mean field benadering geschreven worden als:

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{g} \sum_{k \in \mathcal{D}} \sum_{k' \in \mathcal{D}} \hat{c}_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}', \downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}', \uparrow} \approx \\ & \sum_{k \in \mathcal{D}} \left(\Delta^* \hat{c}_{-\mathbf{k}', \downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}', \uparrow} + \hat{c}_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} \Delta \right) + \frac{|\Delta|^2}{g} \end{aligned}$$

Ook wordt er een vernieuwd energie spectrum ingevoerd $\xi_{\mathbf{k}}$. Dit spectrum is niets anders dan het gewone gecorrigeerd voor de chemische potentiaal, die de rol zal spelen van Lagrange vermenigvuldiger die het aantal fermionen vastlegt: $\xi_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu$. Hiermee wordt de volledige vorm van de hamiltoniaan:

$$\hat{H}_{BCS} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \xi_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} + \sum_{k \in \mathcal{D}} \left(\Delta^* \hat{c}_{-\mathbf{k}', \downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}', \uparrow} + \hat{c}_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} \Delta \right) + \frac{|\Delta|^2}{g} \quad (5.4)$$

Deze vorm kan vereenvoudigd worden door over te gaan op een matrix notatie. Dit gebeurt via de Nambu spinoren en de matrix $H_{\mathbf{k}}$:

$$\bar{c}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger \\ \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow} \end{pmatrix} \quad (5.5a)$$

$$H_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \xi_{\mathbf{k}} & \Delta \\ \Delta^* & -\xi_{-\mathbf{k}} \end{pmatrix} \quad (5.5b)$$

Dit geeft de volgende vorm van de hamiltoniaan:

$$\hat{H}_{BCS} = \sum_{\mathbf{k} \notin \mathcal{D}, \sigma} \xi_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} + \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{D}, \sigma} \xi_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{D}} \bar{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \cdot H_{\mathbf{k}} \cdot \bar{c}_{\mathbf{k}} + g |\Delta|^2 \quad (5.6)$$

Het is duidelijk te zien dat de enige niet diagonale term de term $\sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{D}} \bar{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \cdot H_{\mathbf{k}} \cdot \bar{c}_{\mathbf{k}}$ is. Deze kan gediagonaliseerd worden via de Bogoliubov transformatie, $B_{\mathbf{k}}$. Deze transformatie zet de Nambu spinor van het deeltje, $\bar{c}_{\mathbf{k}}$ om in een spinor voor een quasi-deeltje. De transformatie kan gevonden worden door $\hat{H}_{\mathbf{k}}$ te diagonaliseren. De eigenwaarden zijn:

$$\begin{aligned} E_k &= \pm \sqrt{\xi_k^2 + |\Delta|^2} \\ &= \pm \sqrt{(\varepsilon_k - \mu)^2 + |\Delta|^2} \end{aligned} \quad (5.7)$$

De transformatie is dan gegeven door de volgende transformatie matrix:

$$B_k = \frac{1}{\sqrt{2E_k}} \begin{pmatrix} \sqrt{E_k + \xi_k} & \sqrt{E_k - \xi_k} \\ -\sqrt{E_k - \xi_k} & \sqrt{E_k + \xi_k} \end{pmatrix} \quad (5.8)$$

Deze transformatie kan toegepast worden op de creatie en annihilatie operatoren, $\hat{c}_{k,\sigma}^\dagger$ en $\hat{c}_{k,\sigma}$. Dan verkrijgt men de creatie en annihilatie operatoren van quasi-deeltjes, $\hat{\alpha}_{k,\sigma}^\dagger$ en $\hat{\alpha}_{k,\sigma}$. Deze deeltjes zijn fermionen want de operatoren voldoen aan de anticommutatie regels. Ze stellen de gebroken cooper paren voor. Er geldt dus:

$$\begin{pmatrix} \hat{\alpha}_{k,\uparrow} \\ \hat{\alpha}_{-k,\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2E_k}} \begin{pmatrix} \sqrt{E_k + \xi_k} & \sqrt{E_k - \xi_k} \\ -\sqrt{E_k - \xi_k} & \sqrt{E_k + \xi_k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{c}_{k,\uparrow} \\ \hat{c}_{-k,\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad (5.9)$$

Door deze transformatie toe te passen, kan de Hamiltoniaan gediagonaliseerd worden. Omdat de transformatie unitair is, geldt er:

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{D}} \bar{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \cdot H_{\mathbf{k}} \cdot \bar{c}_{\mathbf{k}} &= \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{D}} \bar{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \cdot (B_{\mathbf{k}}^\dagger B_{\mathbf{k}}) \cdot H_{\mathbf{k}} \cdot (B_{\mathbf{k}}^\dagger B_{\mathbf{k}}) \cdot \bar{c}_{\mathbf{k}} \\ &= \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{D}} (\bar{c}_{\mathbf{k}}^\dagger B_{\mathbf{k}}^\dagger) \cdot (B_{\mathbf{k}} H_{\mathbf{k}} B_{\mathbf{k}}^\dagger) \cdot (B_{\mathbf{k}} \bar{c}_{\mathbf{k}}) \\ &= \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{D}} \begin{pmatrix} \hat{\alpha}_{k,\uparrow}^\dagger & \hat{\alpha}_{-k,\downarrow} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} E_k & 0 \\ 0 & -E_k \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \hat{\alpha}_{k,\uparrow} \\ \hat{\alpha}_{-k,\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \\ &= \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{D}} (E_k \hat{\alpha}_{k,\uparrow}^\dagger \hat{\alpha}_{k,\uparrow} - E_k \hat{\alpha}_{-k,\downarrow} \hat{\alpha}_{-k,\downarrow}^\dagger) \\ &= \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{D}, \sigma} E_k \hat{\alpha}_{k,\sigma}^\dagger \hat{\alpha}_{k,\sigma} - \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{D}} E_k \end{aligned}$$

Alle termen van de hamiltoniaan kunnen samengebracht worden tot de volgende gediagonaliseerde hamiltoniaan. Deze bestaat uit twee duidelijke delen, een deel dat de vacuum energie voorstelt van de α deeltjes en een deel dat de excitatie voorstelt en dus het energie spectrum van de α deeltjes:

$$\hat{H}_{BCS} = \sum_{k \notin \mathcal{D}, \sigma} \xi_k \hat{c}_{k, \sigma}^\dagger \hat{c}_{k, \sigma} + \sum_{k \in \mathcal{D}} (\xi_k - E_k) + \frac{|\Delta|^2}{g} + \sum_{k \in \mathcal{D}, \sigma} E_k \hat{\alpha}_{k, \sigma}^\dagger \hat{\alpha}_{k, \sigma} \quad (5.10)$$

De energie α -vacuum wordt voorgesteld door de eerste drie termen. Deze termen zijn de deeltjes die diep in de Fermi bol zitten en dus niet bijdragen tot elektron-fononverstrooiing wanneer het om elektronen gaat. De tweede term is het verschil in energiespectrum van de oorspronkelijke deeltjes en de quasi deeltjes. En de derde term is een energie ten gevolge van paring van de deeltjes. De term die de creatie en annihilatieoperatoren bevat van de α -deeltjes bevat is niets anders dan het energie spectrum van een niet interagerend gas van quasi-deeltjes. Dit spectrum noemt men het Bogoliubov spectrum en het hangt af van een parameter Δ en het spectrum van de interagerende deeltjes. Omdat het afhangt van het oorspronkelijke spectrum zal het dus ook afhangen van het al dan niet relativistisch zijn van het oorspronkelijk spectrum. Dit wordt nader bekeken in de komende sectie.

5.1.1 Bogoliubov spectrum

Het Bogoliubov spectrum is in het niet relativistisch geval gegeven door:

$$E_k^{NR} = \sqrt{\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}\right)^2 + |\Delta|^2} \quad (5.11)$$

Dit hangt af van de parameter Δ , deze parameter zal ervoor zorgen dat er een minimale energie nodig is om een α -deeltje te exciteren. Dit betekent dat er een minimale energie nodig is om een Cooperpaar op te breken. Om deze reden wordt Δ de bandkloof genoemd.

In het relativistische geval is het kinetische energiespectrum gegeven door: $\sqrt{m^2 c^4 + \hbar^2 k^2 c^2} - mc^2$, de extra term $-mc^2$ staat er om ervoor te zorgen dat $k = 0$ overeenkomt met een energie 0. De fermi energie bekomt men door $k = k_F$ stellen, $E_F^{rel} = \sqrt{m^2 c^4 + \hbar^2 k_F^2 c^2} - mc^2$. Dit leidt tot het volgende Bogoliubov spectrum.

$$E_k^{rel} = \sqrt{\left(\left(\sqrt{m^2 c^4 + \hbar^2 k^2 c^2} - mc^2\right) - \left(\sqrt{m^2 c^4 + \hbar^2 k_F^2 c^2} - mc^2\right)\right)^2 - |\Delta|^2} \quad (5.12)$$

Het Bogoliubov spectrum kan dimensieloos gemaakt worden door energieën in eenheden van fermi-energie te zetten en golfvectors in eenheden van de fermi-golfvector. Een andere interessante grootte is de Compton golflengte. Deze is een aanduiding of een deeltje een relativistisch karakter heeft of het zich in de niet-relativistische limiet bevindt.

De Compton golfvector is gegeven door $k_C = \frac{mc}{\hbar}$. Door dit te gebruiken komt

er:

$$\begin{aligned}
E_k^{rel} &= \sqrt{\left(mc^2 \left(\sqrt{1 + \frac{\hbar^2 k^2}{m^2 c^2}} - 1 \right) - mc^2 \left(\sqrt{1 + \frac{\hbar^2 k_F^2}{m^2 c^2}} - 1 \right) \right)^2 - |\Delta|^2} \\
&= \sqrt{\left(mc^2 \left(\sqrt{1 + \frac{k^2}{k_C^2}} - 1 \right) - mc^2 \left(\sqrt{1 + \frac{k_F^2}{k_C^2}} - 1 \right) \right)^2 - |\Delta|^2} \\
\Rightarrow \tilde{E}_k^{rel} &= \sqrt{\left(\frac{\sqrt{1 + \frac{k^2}{k_C^2}} - 1}{\sqrt{1 + \frac{k_F^2}{k_C^2}} - 1} - 1 \right)^2 - |\tilde{\Delta}|^2}
\end{aligned}$$

Waarbij $\tilde{E}_k^{rel} = \frac{E_k^{rel}}{E_F}$ en $\tilde{\Delta} = \frac{\Delta}{E_F}$. De golfvectoren zullen ook in dimensieloze eenheid worden omgezet. Hiervoor geldt: $q = \frac{k}{k_F}$ en $q_C = \frac{k_C}{k_F}$. Dit leidt tot de uiteindelijke uitdrukking:

$$\tilde{E}_k^{rel} = \sqrt{\left(\frac{\sqrt{1 + (q/q_C)^2} - 1}{\sqrt{1 + 1/q_C^2} - 1} - 1 \right)^2 + |\tilde{\Delta}|^2} \quad (5.13)$$

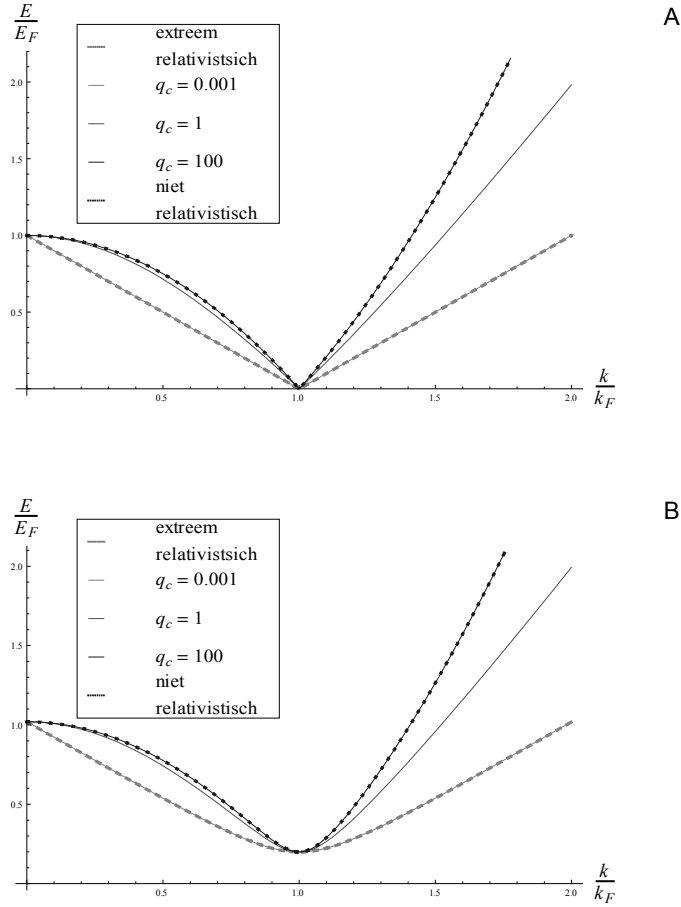
De parameter q_C kan gebruikt worden om het regime te bepalen. Wanneer $q_C \gg 1$ dan zit men in het niet relativistische regime. Wanneer q_C naar nul gaat dan zit men in het extreem relativistische regime, het regime waarvoor geldt dat $m = 0$ en waarbij de deeltjes de lichtsnelheid bereiken. Voor dit regime bestaat er ook een exacte uitdrukking want hier hebben de deeltjes een lineair kinetisch energie spectrum. Het Bogoliubov spectrum voor dit regime wordt dan gegeven door:

$$\begin{aligned}
E_k^{ER} &= \sqrt{(\hbar k c - \hbar k_F c)^2 + |\Delta|^2} \\
\Rightarrow \tilde{E}_k^{ER} &= \sqrt{(q - 1)^2 + |\tilde{\Delta}|^2}
\end{aligned} \quad (5.14)$$

Deze functies worden met elkaar vergeleken voor $\tilde{\Delta} = 0$ en $\tilde{\Delta} = 0, 2$ in figuur 5.1. In deze figuur is het Bogoliubov spectrum geplot voor enerzijds $\tilde{\Delta}$ gelijk aan nul en anderzijds gelijk aan 0, 2.

Dit is telkens geplot voor de gekende uitdrukkingen in het niet-relativistisch geval en het extreem relativistisch geval, aangeduid met stippellijnen. Ook is telkens de algemene uitdrukkingen voor drie verschillende waarden voor q_C . Er is inderdaad te zien voor $q_C = 0.001 \ll 1$ dit overeenkomt met het extreem-relativistisch geval. En voor $q_C = 100 \gg 1$ dit het niet-relativistisch geval volgt.

Op de figuur is de invloed duidelijk te zien van zowel de bandkloof als het relativistisch effect. De bandkloof wordt zichtbaar door het feit dat een excitatie energie gaat kosten, er namelijk een energie gelijk aan Δ nodig om een α -deeltje te creëren.



Figuur 5.1: Plot van het Bogoliubov spectrum voor verschillende q_c waarden vergeleken met de gekende uitdrukkingen voor de limiet gevallen. Figuur A is voor $\tilde{\Delta} = 0$. Figuur B is voor $\tilde{\Delta} = 0,2$. Hierbij zijn de stippellijnen de plots van de exacte uitdrukkingen.

5.2 Vrije energie

Nu de Hamiltoniaan gekend is kan hieruit de vrije energie berekend worden. Voor lage temperaturen is deze gegeven door de verwachtingswaarde van de Hamiltoniaan (5.10). De eerste term is een term die niet meespeelt in de eigenschappen van het superfluïde gas. Het is onafhankelijk van de bandkloof, Δ , deze kan weggewerkt worden door het verschil te nemen in vrije energie met de vrije energie voor $\Delta = 0$.

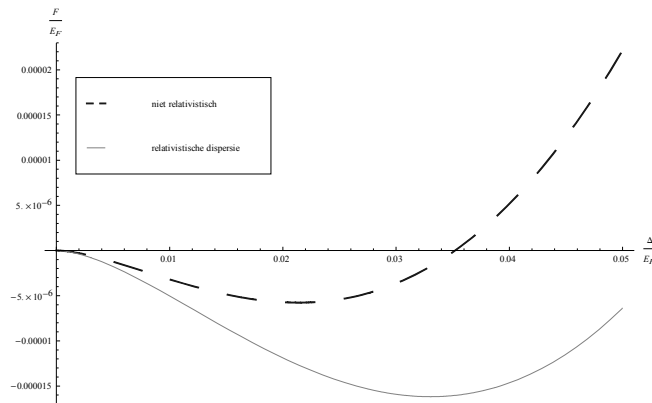
Als de temperatuur nul wordt gesteld is de verwachtingswaarde van de laatste term gegeven door een Heaviside theta functie omdat er bij temperatuur nul

geen excitaties van de α -quasideeltjes zijn. Er komt dus voor de vrije energie:

$$\Omega = \sum_{k \in \mathcal{D}} (\xi_k - E_k) + \frac{|\Delta|^2}{g} \quad (5.15)$$

Aan de hand van deze functie kunnen de stabiele toestanden bepaald worden. Hieruit kan eveneens onderzocht worden welke van deze stabiele toestanden de laagste energie hebben en dus het voordeligst zijn.

In de uitdrukking kunnen de sommen vervangen worden door integralen in de k -ruimte. Als voorbeeld wordt de vrije energie voor een supergeleider uitgerekend. Door de gebruikte dispersie te vervangen door een relativistische variant kan eveneens het verschil tussen beide worden getoond. Voor een supergeleider met $\hbar\omega_D = 0.3 E_F$ en een interactie sterkte $1/g = 10 E_F$ verkrijgt men een minimum bij $\Delta \approx 0.022$, fig. 5.2. Op de figuur is te zien dat het minimum verschuift wanneer men een relativistische dispersie gebruikt. Dit betekent dat de bandkloof vergroot wanneer men naar het meer relativistische regime gaat.



Figuur 5.2: Vrije energie in functie van de bandkloof

De gevonden vrije energie is die voor een supergeleider omdat hier nog een beperking geldt dat enkel deeltjes in een schil rond de Fermibol met elkaar kunnen interageren. Wanneer men een superfluide Fermigas wenst te onderzoeken valt deze beperking weg. De interactie is dan gegeven door een contactinteractie. Deze vorm van interactie wordt typische bepaald door de interactielengte. Volgens verstrooiingstheorie, hoofdstuk 2 bestaat er een relatie tussen de interactiesterkte, $1/g$, en de interactielengte, a_s .

$$\frac{1}{g} = \frac{m}{4\pi\hbar^2 a_s} + C_k \quad (5.16)$$

Hierin stelt C_k de renormalisatie voor. In hoofdstuk 2 is gevonden dat deze overeenkomt met $G(k', k')$. Dit is afgeleid in een niet-relativistische beschrijving. Verder wordt besproken hoe hiervoor gecorrigeerd kan worden. Daarom wordt

ze voorlopig nog genoteerd als C_k .

Om de bandkloofvergelijking uit de vrije energie af te leiden is het beter om te vertrekken van een uitdrukking van de vrije energie bij eindige temperaturen en later de limiet naar temperatuur nul te nemen. De uitdrukking van de energie bij eindige temperaturen komt er door de gevonden Heavisidetheta functie te verbreden. Volgens [14] leidt dit dan samen met (5.16) tot:

$$\Omega = - \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left\{ \frac{1}{\beta} \ln(2 \cosh(\beta E_k)) - \xi_k - C_k \Delta^2 \right\} - \frac{m\Delta^2}{4\pi\hbar^2 a_s} \quad (5.17)$$

Wanneer hier de temperatuur naar nul wordt gebracht krijgt men uitdrukking (5.15), want:

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \ln(2 \cosh(\beta E_k)) = E_k \quad (5.18)$$

5.3 Bandkloofvergelijking

De bandkloofvergelijking is de vergelijking die de bandkloof geeft waarvoor de vrije energie een minimum heeft. Deze vergelijking kan bekomen worden uit de definitie van Δ , uitdrukking 5.3, of door de vrije energie rechtstreeks te minimaliseren. Dit betekent dus afleiden naar Δ en nul stellen. Zoals gezien in de vorige sectie is de vrije energie voor een Fermigas gegeven door:

$$\Omega = - \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left\{ \frac{1}{\beta} \ln(2 \cosh(\beta E_k)) - \xi_k - C_k \Delta^2 \right\} - \frac{m\Delta^2}{4\pi\hbar^2 a_s} \quad (5.19)$$

Nu kan dit gedifferentieerd worden naar Δ : Hiervoor is $\frac{\partial E_k}{\partial \Delta}$ nodig. Dit is gelijk aan:

$$\frac{\partial E_k}{\partial \Delta} = \frac{\partial}{\partial \Delta} \sqrt{\xi_k^2 + \Delta^2} = \frac{\Delta}{E_k}$$

Hierdoor wordt de minimalisatie van de vrije energie:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Omega}{\partial \Delta} &= - \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left\{ \frac{1}{\beta} \tanh(\beta E_k) \beta \frac{\Delta}{E_k} - 2C_k \Delta \right\} - \frac{2m\Delta}{4\pi\hbar^2 a_s} = 0 \\ \Rightarrow \frac{2m\Delta}{4\pi\hbar^2 a_s} &= - \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left\{ \tanh(\beta E_k) \frac{\Delta}{E_k} - 2C_k \Delta \right\} \end{aligned} \quad (5.20)$$

Hierin is al 1 oplossing duidelijk te zien. $\Delta = 0$ is altijd een oplossing, dit betekent dat de normale fase, niet superfluïde of supergeleidend, altijd een extremum van de vrije energie is. Als er dus een superfluïde fase gevonden wordt, moet er gecontroleerd worden of deze een beter minimum is van de vrije energie. De $\Delta = 0$ oplossing kan al weggedeeld worden.

$$\frac{2m}{4\pi\hbar^2 a_s} = - \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left\{ \tanh(\beta E_k) \frac{1}{E_k} - 2C_k \right\} \quad (5.21)$$

Dit wordt verder behandeld in de limiet van temperatuur nul. In de limiet van temperatuur nul, β oneindig, wordt $\tanh(\beta E_k) = 1$. Hiermee krijgt men de volgende vorm van de bandkloofvergelijking:

$$\frac{m}{2\pi\hbar^2 a_s} = - \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left\{ \frac{1}{E_k} - 2C_k \right\} \quad (5.22)$$

Deze kan dan omgezet worden naar bolcoördinaten in k omdat de energie enkel afhangt van de grote van k . Dit leidt tot:

$$\frac{m}{2\pi\hbar^2 a_s} = - \int_0^\infty \frac{dk}{2\pi^2} k^2 \left\{ \frac{1}{E_k} - 2C_k \right\} \quad (5.23)$$

Hierin kan dan de juiste vorm van E_k worden ingevuld. En daarna kan de juiste vorm van C bepaald worden. In het hoofdstuk over verstrooiingstheorie, hoofdstuk 2, is er gezien dat deze renormalisatie gegeven wordt door 1 gedeeld door de kinetische energie dispersie. In de volgende subsectie wordt nagegaan hoe dit gecorrigeerd wordt voor een relativistische beschrijving.

Een andere manier om de divergentie te ontwijken is door een cut-off in te voeren. Bij supergeleiding komt deze op natuurlijke wijze door het feit dat de interactie gebeurt via fononen. Hier is de Debeyegolfvector dus een cut-off. In koude gassen kan de Vander Waals lengte gebruikt worden als natuurlijke cut-off. Deze is typisch van de orde van honderd keer de fermi golf vector.

Eerst wordt de energie dispersie ingevuld in de bandkloofvergelijking. De energie dispersie E_k is gegeven door de Bogoliubovdispersie, uitdrukking 5.12. Er wordt gebruik gemaakt van een dimensieloze versie van de Bogoliubovdispersie. In deze uitdrukking is gebruik gemaakt van het feit dat in het kader van de BCS behandeling de chemische potentiaal gelijk is aan de fermi-energie. In de sectie over het Bogoliubovspectrum, 5.1.1, is de Fermi-energie als energieëenheid gebruikt.

Een andere mogelijkheid is om rustmassa als eenheid van energie te nemen. Dit leidt echter tot ongewenste effecten wanneer het extreem relativistisch regime wordt bestudeerd, omdat in dat regime de rustmassa niet correct gedefiniëerd kan worden. Dit regime is immers voor deeltjes zonder massa.

Vertrekkende van de algemene uitdrukking van de Bogoliubovdispersie, 5.12 en het even achterwege laten van de renormalisatie, krijgt men als integrand in de bandkloofvergelijking:

$$\begin{aligned} \frac{k^2}{E_k} &= \frac{k^2}{\left(\left(\sqrt{m^2 c^4 + \hbar^2 k^2 c^2} - mc^2 - \sqrt{m^2 c^4 + \hbar^2 k_F^2 c^2} + mc^2 \right)^2 + |\Delta|^2 \right)^{1/2}} \\ &= \frac{k^2}{mc^2 \left(\sqrt{1 + k_F^2/k_C^2} - 1 \right) \left(\left(\frac{\sqrt{1+k^2/k_C^2} - 1}{\sqrt{1+k_F^2/k_C^2} - 1} - 1 \right)^2 + \left| \frac{\Delta}{E_F} \right|^2 \right)^{1/2}} \end{aligned}$$

De golfvectors worden in eenheden van de Fermigolfvector gezet, $q = k/k_F$.

Met het hernoemen van $\Delta = \Delta/E_F$, leidt dit tot:

$$\begin{aligned}
\frac{m}{2\pi\hbar^2 a_s} &= -k_F^3 \int_0^\infty \frac{dq}{2\pi^2} q^2 \left\{ \left[mc^2 \left(\sqrt{1 + \frac{1}{q_C^2}} - 1 \right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. \times \left(\left(\frac{\sqrt{1 + q^2/q_C^2} - 1}{\sqrt{1 + 1/q_C^2} - 1} - 1 \right)^2 + |\Delta|^2 \right)^{1/2} \right]^{-1} - 2C_q \right\} \\
\Rightarrow \frac{1}{k_F a_s} &= -\frac{\hbar^2 k_F^2}{m^2 c^2} \frac{1}{\pi} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{1}{q_C^2}} - 1} \int_0^\infty dq q^2 \\
&\quad \times \left\{ \left(\left(\frac{\sqrt{1 + q^2/q_C^2} - 1}{\sqrt{1 + 1/q_C^2} - 1} - 1 \right)^2 + |\Delta|^2 \right)^{-1/2} - E_F 2C_q \right\} \\
\Rightarrow \frac{1}{k_F a_s} &= -\frac{1}{\pi q_C^2 \left(\sqrt{1 + 1/q_C^2} - 1 \right)} \\
&\quad \times \int_0^\infty dq q^2 \left\{ \left(\left(\frac{\sqrt{1 + q^2/q_C^2} - 1}{\sqrt{1 + 1/q_C^2} - 1} - 1 \right)^2 + |\Delta|^2 \right)^{-1/2} - E_F 2C_q \right\}
\end{aligned} \tag{5.24}$$

Hier is de reden te zien waarom er Fermi-eenheden gekozen zijn voor de golfvectoren. Door deze keuze kan namelijk het rechterlid in de vorm $\frac{1}{k_F a_s}$ gezet worden. Dit is een grootheid die veel gebruikt wordt wanneer zulke problemen bekeken worden. Het is de verstrooiingslengte van de interactie in combinatie met de Fermigolfvector. Dit is een maat voor de interactie sterkte tussen de atomen

Nu dient enkel de renormalisatie bepaald te worden. Dit zal in de volgende subsectie toegelicht worden.

Wanneer de renormalisatie bekend is, kan deze vergelijking opgelost worden. De vergelijking geeft dan de bandkloof die hoort bij een bepaalde verstrooiingslengte, dit in functie van de parameter q_C .

5.3.1 Renormalisatie

In het bekende niet relativistische geval is de renormalisatieterm C_k in (5.16) gegeven door de kinetische energie dispersie, zie hoofdstuk 2:

$$C_k = \frac{1}{\varepsilon_k} \tag{5.25}$$

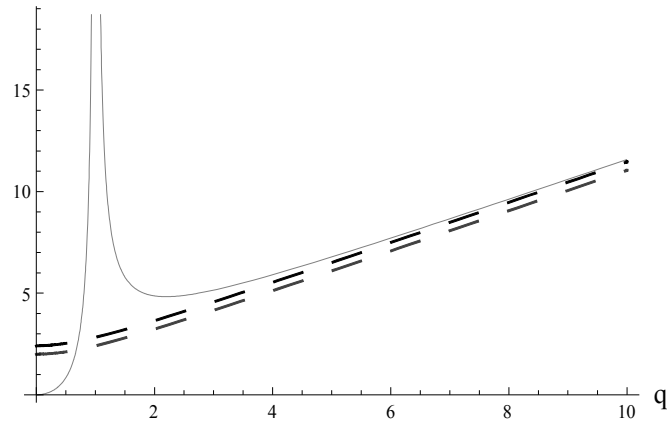
Naief kan men dan proberen om hierin de relativistische dispersie in te substitueren. Zo bekomt men een eerste poging tot renormalisatie, die in dimen-

sieloze eenheden wordt gezet:

$$\begin{aligned} \int_0^{k_{cut}} dk \frac{k^2}{\varepsilon_k} &= \int_0^{k_{cut}} dk \frac{k^2}{\sqrt{m^2 c^4 + \hbar^2 c^2 k^2} - mc^2} \\ &= \frac{1}{mc^2} \int_0^{k_{cut}} dk \frac{k^2}{\sqrt{1 + \frac{\hbar^2 k^2}{m^2 c^2}} - 1} \\ &= \frac{k_F^3}{mc^2} \int_0^{q_{cut}} dq \frac{q^2}{\sqrt{1 + \frac{q^2}{q_C^2}} - 1} \end{aligned} \quad (5.26)$$

$$(5.27)$$

Als deze uitdrukking wordt vergeleken met het integrand in de bandkloofvergelijking, dan ziet men dat dit nog niet voldoende is om de integraal te doen convergeren. Er blijft namelijk nog een constante bijdrage over. Deze bijdrage blijkt gelijk te zijn aan de Fermi-energie. Als de Fermi-energie wordt opgeteld bij de eerder bekomen renormalisatie dan ziet men dat dit inderdaad voldoende is. Dit is grafisch weergegeven in figuur 5.3.



Figuur 5.3: Op deze figuur is het integrand van de bandkloofvergelijking geplott (volle lijn). De stippellijnen stellen de renormalisaties voor. De lichtere lijn stelt de naieve poging voor. De donkere lijn is gecorrigeerd met de Fermi-energie.

De extra term ten gevolge van de bijdrage van de Fermi-energie valt weg wanneer men de limiet neemt naar het niet relativistische regime. Dit is rechtstreeks te zien door $1/q_C$ gelijk te stellen aan nul:

$$\sqrt{1 + \frac{1}{q_C^2}} - 1 \Rightarrow \sqrt{1} - 1 = 0 \quad (5.28)$$

De overgebleven integraal in de renormalisatie (5.26) kan analytisch worden

opgelost.

$$\begin{aligned}
\int_0^{q_{cut}} dq \frac{q^2}{\sqrt{1 + \frac{q^2}{q_C^2} - 1}} &= q_C^3 \int_0^{x_{cut}} dx \frac{x^2}{\sqrt{1 + x^2 - 1}} \\
&= q_C^3 \int_0^{x_{cut}} dx \frac{x^2 (\sqrt{1 + x^2} + 1)}{x^2} \\
&= q_C^3 \left(\int_0^{x_{cut}} \sqrt{1 + x^2} dx + \int_0^{x_{cut}} dx \right) \\
&= q_C^3 \left(\frac{1}{2} \left(x_{cut} \sqrt{1 + x_{cut}^2} + \operatorname{arcsinh}(x_{cut}) \right) + x_{cut} \right) \\
&= \frac{q_C^3}{2} \left(\frac{q_{cut}}{q_C} \sqrt{1 + \left(\frac{q_{cut}}{q_C} \right)^2} + \operatorname{arcsinh} \left(\frac{q_{cut}}{q_C} \right) + 2 \frac{q_{cut}}{q_C} \right)
\end{aligned}$$

Samen met de term die de bijdrage bevat van de Fermi-energie geeft deze oplossing de volledige renormalisatie die gebruikt zal worden om de integraal van de bandkloofvergelijking op te lossen. Door de voorfactoren mee te nemen ten gevolge van het invoeren van $1/k_F a_s$ wordt de renormalisatie gegeven door:

$$\begin{aligned}
C &= \frac{q_C}{2\pi} \left(\frac{q_{cut}}{q_C} \sqrt{1 + \left(\frac{q_{cut}}{q_C} \right)^2} + \operatorname{arcsinh} \left(\frac{q_{cut}}{q_C} \right) + 2 \frac{q_{cut}}{q_C} \right) \\
&\quad + \frac{q_{cut}}{\pi} \left(\sqrt{1 + \left(\frac{1}{q_C} \right)^2} - 1 \right) \tag{5.29}
\end{aligned}$$

Nu de renormalisatie bekend is kan getracht worden om de bandkloofvergelijking op te lossen. Dit zal gebeuren via numerieke integratie. Om numerieke integratie te gebruiken zal er een bovengrens worden ingevoerd. Deze wordt groot genoeg gekozen om ervoor te zorgen dat er zo weinig mogelijk verloren gaat. Hiervoor is de renormalisatie belangrijk. Anderzijds zal voor grote q het integrand en de renormalisatie zeer groot worden. Als dan de bovengrens te groot wordt gekozen resulteert dit in een grote numerieke fout. Daarom is het interessant om op zoek te gaan naar manieren om de berekening te toetsen.

Een van die manieren is om de limiet te nemen naar een bekende uitdrukking of resultaat. Zo zullen in de volgende subsecties een analytische uitdrukkingen berekend worden voor het niet-relativistische en het extreem relativistische regime. Deze uitdrukkingen kunnen dan vergeleken worden met de numerieke berekening van de algemene uitdrukking van de bandkloof voor een correcte waarde van de parameter q_C . Zoals gezien in sectie 5.1.1 over het Bogoliubovspectrum komt dit er op neer om q_C zeer dicht bij nul te nemen voor het extreem relativistische regime, voor het niet-relativistische regime moet q_C groot genomen worden.

5.3.2 Niet-relativistische regime

Dit regime kan gebruikt worden om te controleren of de juiste limiet bekomen wordt voor de algemene uitdrukking (5.24). In het niet relativistische regime

wordt de bandkloofvergelijking (5.23) gegeven door, met ter vereenvoudiging het achterwege laten van de renormalisatieterm C :

$$\frac{m}{2\pi\hbar^2 a_s} = - \int_0^\infty \frac{dk}{2\pi^2} \frac{k^2}{\sqrt{\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}\right)^2 + |\Delta|^2}} \quad (5.30)$$

Dit kan dan zoals voorheen omgezet worden in eenheden van Fermi-energie en de Fermigolflengte. Ter vereenvoudiging zal Δ/E_F genoteerd worden als Δ .

$$\begin{aligned} \frac{m}{2\pi\hbar^2 a_s} &= - \int_0^\infty \frac{dk}{2\pi^2} \frac{k^2}{\frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \sqrt{\left(\frac{k^2}{k_F^2} - 1\right)^2 + |\Delta|^2}} \\ \Rightarrow \frac{1}{k_F a_s} &= - \frac{2}{\pi} \int_0^\infty dq \frac{q^2}{\sqrt{(q^2 - 1)^2 + |\Delta|^2}} \end{aligned} \quad (5.31)$$

De integraal die overblijft in (5.31) dient ook numeriek opgelost te worden.

5.3.3 Extreem relativistisch regime

Het extreem relativistische regime is het regime waarbij er een lineaire dispersie is voor de kinetische energie. In dit regime kan de massa gelijk aan nul gesteld worden. Doordat het er een lineaire dispersie kan gebruikt worden, vereenvoudigt de bandkloofvergelijking tot een vorm die analytisch oplosbaar is.

De Bogoliubovdispersie voor het extreem relativistische regime wordt omgezet in eenheden van Fermi-energie en Fermigolffvector.

$$\begin{aligned} E_k^{ER} &= \sqrt{(\hbar ck - \hbar ck_F)^2 + |\Delta|^2} \\ &= \hbar k_F c \sqrt{\left(\frac{k}{k_F} - 1\right)^2 + \left|\frac{\Delta}{E_F}\right|^2} \\ &= \hbar k_F c \sqrt{(q - 1)^2 + \left|\frac{\Delta}{E_F}\right|^2} \end{aligned}$$

Deze uitdrukking is nu dimensieloos en dit kan ingevuld worden in de bandkloofvergelijking (5.23). Als de renormalisatie even achterwege wordt gelaten krijgt men:

$$\frac{m}{2\pi\hbar^2 a_s} = - \int_0^\infty \frac{dk}{2\pi^2} \frac{k^2}{\hbar k_F c \sqrt{(q - 1)^2 + \left|\frac{\Delta}{E_F}\right|^2}} \quad (5.32)$$

Door de integratie over k om te zetten naar een integratie over q krijgt men:

$$\begin{aligned} \frac{m}{2\pi\hbar^2 a_s} &= - \frac{k_F^2}{\hbar c} \int_0^\infty \frac{dq}{2\pi^2} \frac{q^2}{\sqrt{(q - 1)^2 + \left|\frac{\Delta}{E_F}\right|^2}} \\ \Rightarrow \frac{1}{k_F a_s} &= - \frac{1}{\pi q_C} \int_0^\infty dq \frac{q^2}{\sqrt{(q - 1)^2 + \left|\frac{\Delta}{E_F}\right|^2}} \end{aligned} \quad (5.33)$$

De term $\frac{\Delta}{E_F}$ zal ter vereenvoudiging genoteerd worden als Δ .

Deze vergelijking kan nu analytisch worden opgelost en dan kan later de renormalisatie nog in rekening gebracht worden.

Om de overgebleven integraal (5.33) op te lossen wordt de substitutie $q-1 = x$ doorgevoerd. De bovengrens van de integraal zal vervangen worden door q_{cut} . Deze wordt dan voldoende groot gekozen zodat de renormalisatie ervoor zal zorgen dat het gedrag voor grote q niet mee bijdraagt tot het resultaat.

$$\begin{aligned} \int_0^{q_{cut}} dq \frac{q^2}{\sqrt{(q-1)^2 + |\Delta|^2}} &= \int_0^{x_{cut}+1} dx \frac{(x+1)^2}{\sqrt{x^2 + |\Delta|^2}} \\ &= \left[\int_0^{x_{cut}+1} dx \frac{x^2}{\sqrt{x^2 + |\Delta|^2}} \right. \\ &\quad + \int_0^{x_{cut}+1} dx \frac{2x}{\sqrt{x^2 + |\Delta|^2}} \\ &\quad \left. + \int_0^{x_{cut}+1} dx \frac{1}{\sqrt{x^2 + |\Delta|^2}} \right] \end{aligned}$$

De drie integralen die bekomen zijn, kunnen opgelost worden.

$$\begin{aligned} \int \frac{x^2}{\sqrt{x^2 + |\Delta|^2}} dx &= \frac{1}{2} x \sqrt{x^2 + |\Delta|^2} - \frac{|\Delta|^2}{2} \ln \left(x + \sqrt{x^2 + |\Delta|^2} \right) \\ &\Rightarrow \frac{1}{2} (q-1) \sqrt{(q-1)^2 + |\Delta|^2} \\ &\quad - \frac{|\Delta|^2}{2} \ln \left((q-1) + \sqrt{(q-1)^2 + |\Delta|^2} \right) \\ \int \frac{2x}{\sqrt{x^2 + |\Delta|^2}} dx &= 2 \sqrt{x^2 + |\Delta|^2} \\ &\Rightarrow 2 \sqrt{(q-1)^2 + |\Delta|^2} \\ \int \frac{1}{\sqrt{x^2 + |\Delta|^2}} dx &= \ln \left(x + \sqrt{x^2 + |\Delta|^2} \right) \\ &\Rightarrow \ln \left((q-1) + \sqrt{(q-1)^2 + |\Delta|^2} \right) \end{aligned}$$

Door de grenzen in te vullen en op te tellen krijgt men de oplossing voor de

bandkloofvergelijking in het extreem relativistische regime.

$$\begin{aligned} \frac{1}{k_F a_s} = & -\frac{1}{2q_C \pi} \left[3\sqrt{(q_{cut} - 1)^2 + |\Delta|^2} - 3\sqrt{1 + |\Delta|^2} \right. \\ & + q_{cut} \sqrt{(q_{cut} - 1)^2 + |\Delta|^2} \\ & \left. + (2 - |\Delta|^2) \ln \left(\frac{\sqrt{(q_{cut} - 1)^2 + |\Delta|^2} + q_{cut} - 1}{\sqrt{1 + |\Delta|^2} - 1} \right) \right] \end{aligned} \quad (5.34)$$

Door de renormalisatie in rekening te brengen kan de cut-off naar oneindig gebracht worden. Maar om numerieke redenen wordt deze hier behouden en wordt de cut-off voldoende groot gekozen.

Het valt op dat zelf door de extreem relativistische limiet te gebruiken er nog altijd een parameter q_C voorkomt in de uitdrukking. Deze factor komt er doordat in de verstrooiingstheorie, hoofdstuk 2, gebruik wordt gemaakt van een niet relativistische beschrijving. Als nu naief wordt gekeken naar wat er gebeurd als men in de Lippmann-Schwinger vergelijking (2.4) $\hat{H}_0 = \hbar^2 k^2 / 2m$ vervangt door $\hbar kc$, dan ziet men dat het genoeg is om de factoren $\hbar^2 / 2m$ te vervangen door $\hbar c$. En vindt men dus dat g moet vervangen worden door $4\pi\hbar c a_s$ in plaats van de eerder gebruikte $4\pi\hbar^2 a_s / 2m$.

Deze vervanging kan ook gedaan worden door $4\pi\hbar^2 a_s / 2m$ te delen door $2k_C = 2mc/\hbar$. Men kan dus de overgebleven factor naar de andere kant brengen en dit zien als een correctie op het verkeerde gebruik van de relatie tussen g en a_s die voorkomt uit een niet relativistische beschrijving van de verstrooiingsprocessen.

5.4 Oplossen van de bandkloofvergelijking

Vermits de bandkloofvergelijking opgesteld is en de renormalisatie gekend is, kan de bandkloofvergelijking opgelost worden. Zo kan onderzocht worden hoe de bandkloof Δ afhangt van de verstrooiingslengte a_s en hoe een relativistische dispersie effect heeft op deze relatie.

Om de bandkloofvergelijking op te lossen wordt er gebruik gemaakt van het software pakket Mathematica. Dit software pakket is in staat om integralen numeriek uit te werken door middel van standaard integratie algoritmes. Omdat het gebruikte integrand divergeert moet men met enige voorzichtigheid omspringen met de numerieke integratie. In theorie moet er tot oneindig geïntegreerd worden. Vermits dit niet mogelijk is wordt er tot een zo groot mogelijke bovengrens geïntegreerd. Het probleem met een grote bovengrens is dat dan tijdens de numerieke integratie het effect van de bandkloof klein wordt in vergelijking met de waarde van het integrand aan de bovengrens, het algoritme zal dus het effect van de bandkloof negeren. Om dit te vermijden wordt de integratie opgesplitst in twee delen. Het eerste deel zal zich concentreren op het domein rond de bandkloof, hier gekozen voor $q \in [0, 10]$. Het tweede deel zal dan het grote q gedrag voor zijn rekening nemen. Dit deel is nog steeds nodig zodat de renormalisatie gebruikt kan worden en loopt dus over het domein waarvoor geldt $q \in [10, q_{cut}]$. Nu dient q_{cut} nog gekozen te worden. Omdat de integratie eigenlijk verloopt tot oneindig moet q_{cut} zoals eerder vermeld zo groot mogelijk

gekozen worden. Wanneer q_{cut} arbitrair groot gekozen wordt resulteert dit in zegg grote uitkomsten voor het tweede deel van de integratie en voor de renormalisatie. Wanneer deze te groot worden en dan van elkaar worden afgetrokken verliest men numerieke precisie. Zoals opgemerkt aan het eind van sectie 5.3.3 over het extreem relativistische regime, kan de voorfactor daar geïnterpreteerd worden als een correctie op het gebruik van de niet relativistische beschrijving van de verstrooiing van twee deeltjes. Nu kan de vraag worden gesteld of dit dan ook niet nodig is on de algemene beschrijving. Hier is er een voorfactor van de volgende vorm aanwezig (5.24):

$$\frac{1}{q_C^2 \left(\sqrt{1 + 1/q_C^2} - 1 \right)} \quad (5.35)$$

Als wordt gekeken naar het gedrag van deze q_C afhankelijkheid voor q_C dicht bij nul dan vindt men:

$$\frac{1}{q_C^2 \left(\sqrt{1 + 1/q_C^2} - 1 \right)} \approx q_C - q_C^2 + \mathcal{O}(q_C^3) \quad (5.36)$$

Hierin is te zien dat deze als laagste orde term net de factor heeft die in de extreem relativistische limiet overblijft.

Als wordt gekeken naar de niet relativistische limiet dan vindt men als afhankelijkheid voor grote q_C :

$$\frac{1}{q_C^2 \left(\sqrt{1 + 1/q_C^2} - 1 \right)} \approx \frac{1}{2} - \frac{1}{8} \frac{1}{q_C^2} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{q_C^4}\right) \quad (5.37)$$

Wat overeenkomt met de factor 2 in (5.31).

Er is aangetoond in de beide limieten de voorfactor naar de verwachte waarde gaat. Omdat er in het algemene regime nog niet gecorrigeerd is voor het gebruik van het niet-relativistische resultaat van verstrooiing, zal deze voorfactor die rol toebedeeld krijgen. Deze correctie zal duidelijk gemaakt worden door de verstrooiingslengte a_s voortaan te noteren als de gecorrigeerd a_s^* .

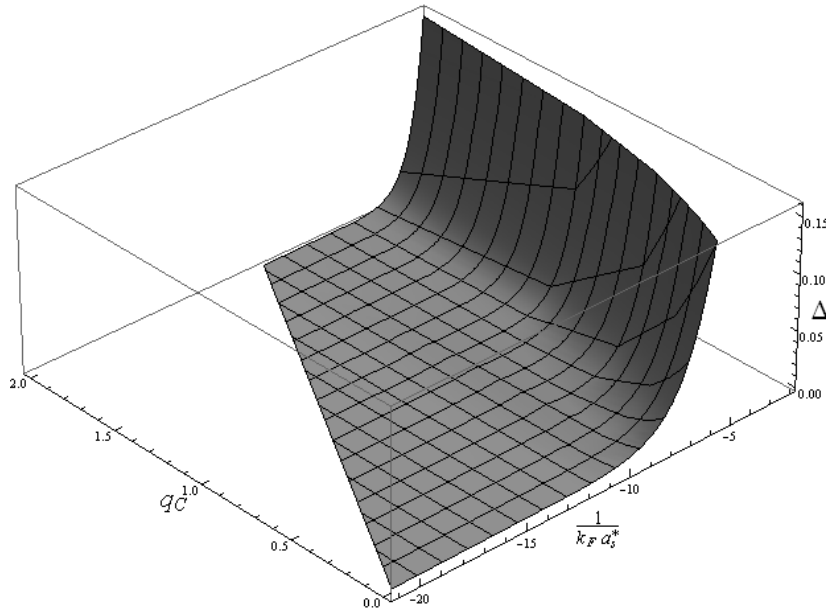
$$a_s^* = \frac{a_s 2}{q_C^2 \left(\sqrt{1 + 1/q_C^2} - 1 \right)} \quad (5.38)$$

De factor 2 komt er om ervoor te zorgen dat de niet relativistische limiet de relatie $a_s^* = a_s$ geeft omdat deze limiet exact bepaald is. Deze vervanging heeft nog een ander voordeel. Op deze manier gebeurt het namelijk dat al de regimes mooi op één grafische voorstelling kunnen weergegeven worden. Want zou men in (5.24) een waarde van $q_C = 10^{-3}$ invullen dan zou de oplossing van de integraal, die van de orde van de eenheid zal zijn, 1000 keer vergroot worden.

Er komt dus voor de bandkloofvergelijking:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{k_F a_s^*} = & -\frac{2}{\pi} \int_0^{q_{cut}} dq \frac{q^2}{\left(\left(\frac{\sqrt{1+q^2/q_C^2} - 1}{\sqrt{1+1/q_C^2} - 1} - 1 \right)^2 + |\Delta|^2 \right)^{1/2}} \\
& + \frac{2}{\pi} \left[\frac{q_C^3}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{1}{q_C^2}} - 1 \right) \right. \\
& \times \left(\frac{q_{cut}}{q_C} \sqrt{1 + \left(\frac{q_{cut}}{q_C} \right)^2} + \operatorname{arcsinh} \left(\frac{q_{cut}}{q_C} \right) + 2 \frac{q_{cut}}{q_C} \right) \\
& \left. + q_{cut} q_C^2 \left(\sqrt{1 + \frac{1}{q_C^2}} - 1 \right)^2 \right] \quad (5.39)
\end{aligned}$$

Dit is de volledige vorm van de bandkloofvergelijking die zal berekend worden. De oplossing van de bandkloofvergelijking (5.39) is grafisch voorgesteld in figuur 5.4. Op deze figuur staat een drie dimensionale voorstelling van deze oplossing. Op de hoogte-as staat Δ dat varieert van 10^{-6} tot 0,15. Op de linkse as staat q_C waarvoor enkele waarde zijn gekozen gaande van 10^{-3} tot 2 zodanig dat de trend duidelijk zichtbaar is. Met deze waarde is dan $1/k_F a_s^*$ berekend.

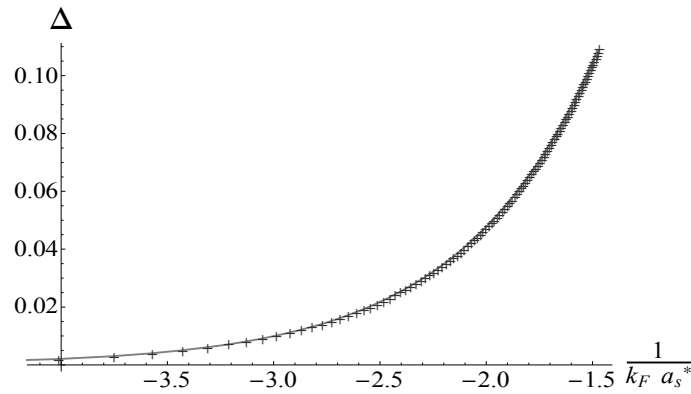


Figuur 5.4: De grafische voorstelling van de bandkloofvergelijking (5.39) in functie van q_C en Δ . Voor het witte gebied werden geen punten meer berekend.

Op figuur 5.4 is te zien dat in het meer relativistische regime, $q_C < 1$ de band-

klouf klein wordt bij sterkere interactie in vergelijking met de niet-relativistische kant, $q_C \gg 1$. Er kan besloten worden dat wanneer de interactie sterkte stijgt, de bandklouf minder snel naar nul gaat in het relativistische regime. Want in het niet relativistische regime is te zien dat voor grotere interactiesterktes, wat betekent dat $1/k_F a_s^*$ zeer negatief is, de bandklouf snel naar nul gaat.

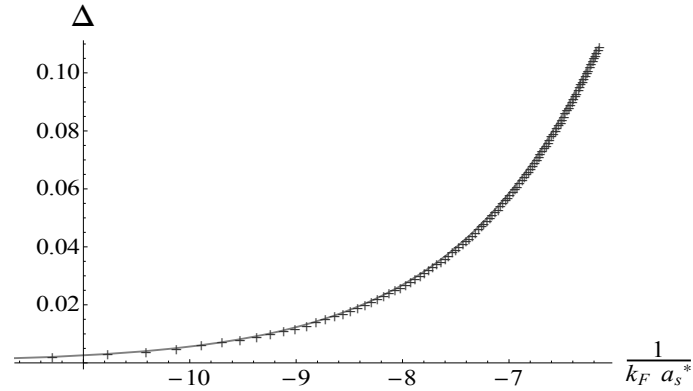
Er kan nu ook gecontroleerd worden of deze resultaten overeenkomen met de juist limieten. Op figuren 5.5 en 5.6 is te zien dat de berekening van de bandkloufvergelijking in de limiet van q_C naar nul of oneindig de juiste resultaten geven.



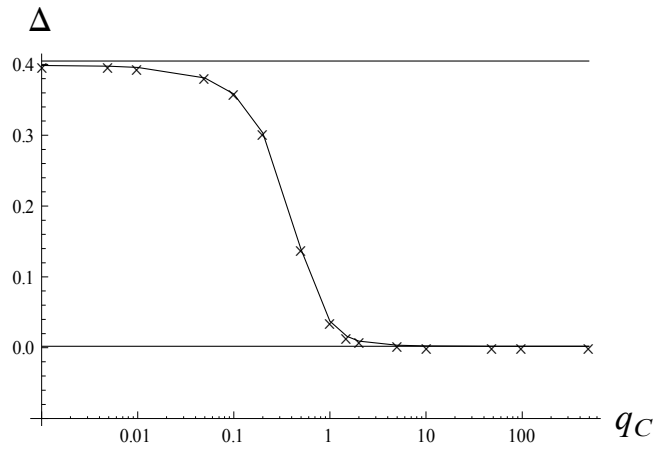
Figuur 5.5: Een plot van de berekening van de bandkloufvergelijking in het niet relativistische regime. Op de figuur wordt de exact gekende uitdrukking (5.31) (volle lijn) vergeleken met een berekening van (5.39) (+) voor hoge q_C .

Om aan te tonen dat een zelfde interactie leidt tot een sterker gebonden Cooperpaar in het relativistische regime, wordt er een vaste $1/k_F a_s^*$ gekozen en daarmee dan berekend welke bandklouf ermee overeenkomt in functie van q_C . Dit bepaald dan hoe de overgang verloopt tussen de regimes. Het is niet de interactiesterkte die zo vast genomen wordt maar de verstrooiingslengte gedeeld door de afstand tussen de deeltjes, $\sim 1/k_F$.

Dit is getoond op figuur 5.7. Op deze figuur zijn ook de twee limiet regimes getoond, ze komen goed overeen met de algemene berekening.



Figuur 5.6: Een plot van de berekening van de bandkloofvergelijking in het extreem relativistische regime. Op de figuur wordt de exact gekende uitdrukking (5.33) (volle lijn) vergeleken met een berekening van (5.39) (+) voor q_C dicht bij nul.



Figuur 5.7: Op deze figuur is de bandkloof Δ uitgezet die in uitdrukking (5.24) $1/k_F a_s^*$ gelijk geeft aan -4 . Ook zijn de oplossingen van de limiet regimes uitgezet (rechte lijnen) met het extreem relativistische resultaat als de bovenste rechte en het niet-relativistische resultaat als de onderste rechte.

Hoofdstuk 6

Fermigas met ongelijke spinpopulatie

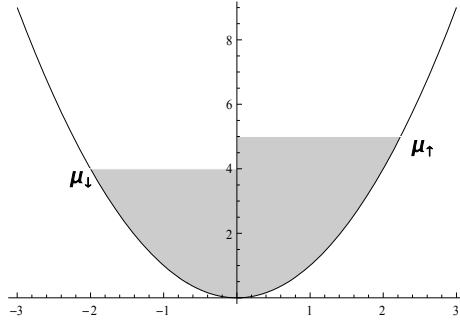
In het vorige hoofdstuk was er geen verschil tussen het aantal spin-op en spin-neer deeltjes.

In dit hoofdstuk wordt de situatie beschouwd waarbij een ongelijke populatie in de verschillende spin componenten bestaat. Omdat de interactie plaatsvindt tussen deeltjes met verschillende spin, betekent dit dat er deeltjes zijn die niet kunnen deelnemen aan de interactie omdat er geen partner voorhanden is om mee op te paren. Het begrip spin betekent dat er twee verschillende soorten deeltjes worden beschouwd, aangeduid met spin op en spin neer. Bij elektronen in een supergeleider is dit de effectieve spin van de elektronen. In een Fermigas kan het een andere interne vrijheidsgraad zijn van het atoom, zoals een andere hyperfijnstoestand.

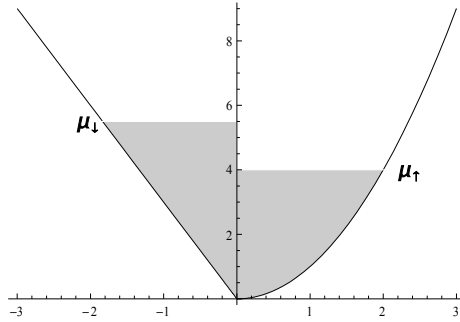
Deze situatie wordt beschreven door een verschil in de chemische potentiaal van de verschillende componenten. Dit kan bekomen worden door een verschillend aantal deeltjes van beide componenten te nemen. Omdat de Fermisfeer dan voor beide componenten tot op een andere hoogte wordt opgevuld leidt dit tot een andere chemische potentiaal. Dit is experimenteel de makkelijkste manier om een verschil in chemische potentiaal te bereiken. Zo kan bij een supergeleider een overschot aan spin op elektronen bekomen worden door een magnetische veld aan te leggen. Dit is echter nog niet experimenteel toegankelijk omdat het magneetveld dat nodig is om een niet-verwaarloosbaar verschil tussen spin-op en spin-neer bezetting te verkrijgen, groter moet zijn dan het kritische magneetveld. Daarom kan spin-onevenwicht nog niet in supergeleidende materialen onderzocht worden maar al wel in ultrakoude gassen.

Theoretisch kan een verschil tussen spin-op en spin-neer chemische potentialen ook bekomen worden door de verschillende componenten een andere dispersie te geven. In dat geval is er ook een spin-onevenwicht tussen de chemische potentialen als de aantallen spin-op en spin-neer deeltjes gelijk zijn. De Fermisfeer wordt dan voor de beide componenten anders opgevuld. Voor het spin op deeltje zijn er dan meer (of minder) toestanden beschikbaar tot op een bepaalde energie waarde.

Om dit effect te kunnen bestuderen moet dit in rekening gebracht worden



Figuur 6.1: Een verschillend aantal deeltjes voor de beide componenten leidt tot een verschillende chemische potentiaal.



Figuur 6.2: Een verschillende dispersie voor de beide componenten leidt tot een verschillende chemische potentiaal, ook als het aantal deeltjes gelijk is.

in de Hamiltoniaan. Dit zal toegelicht worden in de volgende sectie. Hierbij zal de methode gevolgd worden die eerder is gebruikt, sectie 5.1.

6.1 Hamiltoniaan met ongelijke spincomponenten

Om de Hamiltoniaan met ongelijke spincomponenten op te stellen, wordt vertrokken van (5.4). In deze vorm van de Hamiltoniaan is de bandkloof al ingevoerd. Deze definitie verandert niet wanneer men een ongelijke spinpopulatie beschouwt. De aanpassing die moet gebeuren om een ongelijke spinpopulatie in rekening te brengen is het invoeren van verschillende ξ voor spin op ten op zichte van spin neer.

$$\xi_{\mathbf{k},\uparrow} = \varepsilon_{\mathbf{k},\uparrow} - \mu_{\uparrow} \quad (6.1a)$$

$$\xi_{\mathbf{k},\downarrow} = \varepsilon_{\mathbf{k},\downarrow} - \mu_{\downarrow} \quad (6.1b)$$

Zo wordt de Hamiltoniaan (5.4) vervangen door de Hamiltoniaan:

$$\hat{H}_{BCS} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \xi_{\mathbf{k},\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} + \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{D}} \left(\Delta^* \hat{c}_{-\mathbf{k}',\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}',\uparrow} + \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \Delta \right) + \frac{|\Delta|^2}{g} \quad (6.2)$$

Met deze aanpassing kunnen de twee besproken situaties behandeld worden. Indien de situatie zoals in figuur 6.1 zich voordoet dan kan $\varepsilon_{\mathbf{k},\uparrow} = \varepsilon_{\mathbf{k},\downarrow} = \varepsilon_{\mathbf{k}}$ gesteld worden. Met deze beschrijving kan ook onderzocht worden wat er gebeurt wanneer de dispersies verschillen maar door de juiste keuze van het aantal deeltjes de chemische potentialen toch gelijk zijn.

Om de beschrijving van het verschil in chemische potentiaal te vereenvoudigen wordt de gemiddelde chemische potentiaal μ ingevoerd alsook de Zeeman term ζ . Nu kan μ constant genomen worden en kan als functie van ζ onderzocht worden wat het effect is.

$$\mu = \frac{\mu_\uparrow + \mu_\downarrow}{2} \quad (6.3a)$$

$$\zeta = \frac{\mu_\uparrow - \mu_\downarrow}{2} \quad (6.3b)$$

Zo kan er ook een relatie worden op gesteld voor ξ en ε .

$$\xi_{\mathbf{k}} = \frac{\xi_{\mathbf{k},\uparrow} + \xi_{\mathbf{k},\downarrow}}{2} = \frac{\varepsilon_{\mathbf{k},\uparrow} + \varepsilon_{\mathbf{k},\downarrow}}{2} - \frac{\mu_\uparrow + \mu_\downarrow}{2} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu \quad (6.4a)$$

$$\xi_{\mathbf{k},\sigma} = \frac{\xi_{\mathbf{k},\uparrow} - \xi_{\mathbf{k},\downarrow}}{2} = \frac{\varepsilon_{\mathbf{k},\uparrow} - \varepsilon_{\mathbf{k},\downarrow}}{2} - \frac{\mu_\uparrow - \mu_\downarrow}{2} = \varepsilon_{\mathbf{k},\sigma} - \zeta \quad (6.4b)$$

Met deze definitie worden de Nambu spinoren (5.5) ingevoerd. Dit leidt tot een matrixvoorstelling van de hamiltoniaan. In deze voorstelling zullen de diagonaal elementen gegeven worden door de ingevoerde $\xi_{\mathbf{k},\uparrow}$ en $\xi_{\mathbf{k},\downarrow}$.

$$H_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \xi_{\mathbf{k},\uparrow} & \Delta \\ \Delta^* & -\xi_{\mathbf{k},\downarrow} \end{pmatrix} \quad (6.5)$$

Er werd gebruik gemaakt van het feit dat de dispersies symmetrisch zijn, $\xi_{\mathbf{k}} = \xi_{-\mathbf{k}}$.

Als de situatie wordt beschouwd waarbij de verschillende spincomponenten dezelfde kinetische energie dispersie hebben, maar dat er een overschot is aan spin op deeltjes. De verschillende componenten hebben dus een verschillende chemische potentiaal. Deze aanname leidt tot een vereenvoudigde vorm van de matrixvoorstelling.

$$H_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \xi_{\mathbf{k}} - \zeta & \Delta \\ \Delta^* & -\xi_{\mathbf{k}} - \zeta \end{pmatrix} \quad (6.6)$$

Dit kan gediagonaliseerd worden door de Bogoliubov transformatie te gebruiken. Dan vindt men dat het spectrum van de quasi deeltjes afhangt van hun spin:

$$E_{\mathbf{k},\sigma} = \zeta \pm \sqrt{(\xi_{\mathbf{k}} + \mu)^2 + |\Delta|^2} = \zeta \pm E_{\mathbf{k}} \quad (6.7)$$

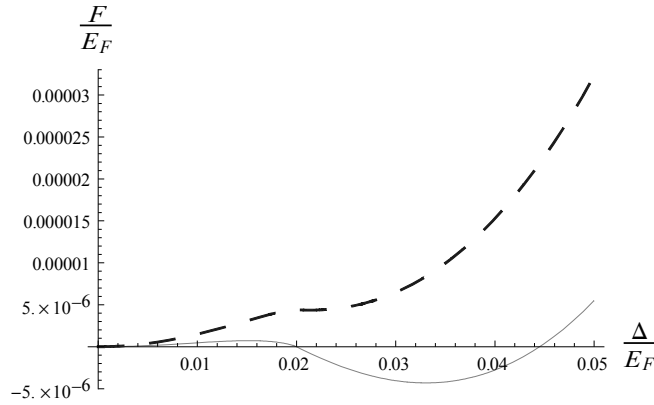
Hierin heeft de spin op een plus teken en spin neer een min teken. Het verschil in spinpopulatie leidt dus tot een verschuiving in het spectrum van

de quasideeltjes. Wanneer het verschil in de spincomponenten (ζ) juist gekozen wordt, kan het spectrum bij een bandkloof verschillend van nul, verschoven worden totdat de excitatie van een quasideeltje geen energie meer kost. Omdat dit quasi deeltje overeenkomt met een gebroken cooperpaar zullen de cooperparen op dat moment spontaan opbreken wat resulteert in het verlies van superfluiditeit of supergeleiding. Dus de ongelijkheid in spin kan ervoor zorgen dat de superfluide toestand niet meer de meest voordelig toestand is van het systeem. Het is dus voornamelijk de Bogoliubovdispersie die verandert. Deze nieuwe dispersie kan ingevuld worden in de vrije energie (5.15) die in het vorige hoofdstuk gevonden is. Er komt dus voor de vrije energie wanneer er een ongelijke spinpopulatie wordt beschouwd:

$$\Omega = \sum_{k \in \mathcal{D}} (\xi_k - E_k) + \frac{|\Delta|^2}{g} + \sum_{k \in \mathcal{D}, \sigma} \Theta(-E_{k,\sigma}) E_{k,\sigma} \quad (6.8)$$

Om het effect van een verschil in chemische potentiaal van beide componenten te bestuderen kan al eens gekeken worden naar de vrije energie. Er kan dan gezocht worden of er inderdaad een verlies is van de superfluide toestand door naar het minimum te kijken van de vrije energie. Er zal waarschijnlijk een minimum bestaan waarbij de bandkloof gelijk is aan nul. De vraag is of er ook nog een minimum bestaat voor een bandkloof die niet nul is en zo ja is deze dan voordeliger van energie.

Om dit te onderzoeken is de zelfde situatie als in figuur 5.2, maar dan het verschil van chemische potentiaal in rekening gebracht door middel van de extra parameter ζ . Deze parameter zal uitgedrukt worden in eenheden van Fermi-energie.



Figuur 6.3: De vrije energie voor $\zeta = 0.02$

Op de figuur 6.3 is duidelijk te zien dat wanneer er ongelijke spinpopulatie is, er een minimum ontstaat voor de bandkloof gelijk aan nul. Voorheen was dit wel een extremum maar geen minimum. Wanneer de ongelijkheid tussen de beide componenten voldoende groot is dat het minimum bij Δ nul zelfs voordeliger wordt in vergelijking met het minimum bij een bandkloof verschillend van nul.

Bij het gebruik van een relativistische dispersie valt op dat de ongelijkheid groter moet zijn vooraleer de $\Delta = 0$ oplossing voordeliger is in energie. Wanneer er dus sprake is van een relativistische dispersie blijkt dus dat de bandkloof beter resistent is tegen een verschil in chemische potentiaal van de spin componenten.

Wanneer de vrije energie wordt omgezet naar eindige temperaturen komt er:

$$\Omega = - \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left[\ln (2\cosh(\beta\zeta) + 2\cosh(\beta E_k)) - \xi_k - C |\Delta|^2 \right] - \frac{m |\Delta|^2}{4\pi\hbar^2 a_s} \quad (6.9)$$

Wanneer de ζ nul wordt gesteld wordt het de vrije energie van het vorige hoofdstuk terug gevonden, uitdrukking (5.19). Wanneer men de temperatuur naar nul laat gaan is wordt het vorige resultaat gevonden.

6.2 Bandkloofvergelijking

Door zoals voorheen de vrije energie af te leiden naar de bandkloof, verkrijgt men de bandkloofvergelijking. Dit wordt:

$$\frac{\partial\Omega}{\partial\Delta} = 0 \Leftrightarrow \frac{m\Delta}{2\pi\hbar^2 a_s} = - \int \frac{d^3k}{(2\pi)^2} \left[\frac{1}{\beta} \frac{\sinh(\beta E_k)}{\cosh(\beta\zeta) + \cosh(\beta E_k)} \frac{\beta\Delta}{E_k} - C\Delta \right] \quad (6.10)$$

Wanneer hier de limiet wordt genomen voor temperatuur gaande naar nul vindt men dat

$$\frac{\sinh(\beta E_k)}{\cosh(\beta\zeta) + \cosh(\beta E_k)} \quad (6.11)$$

naar een Heaviside thetalfunctie convergeert. Dit is grafisch weergegeven op figuur 6.4.

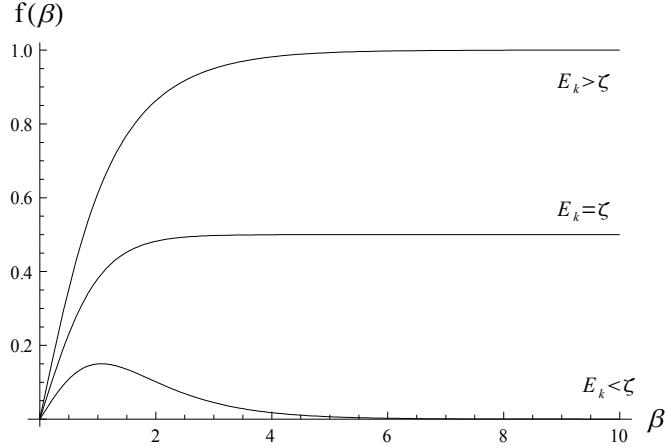
Hiermee wordt de bandkloofvergelijking dus in de temperatuur nul limiet en met het wegdelven van de $\Delta = 0$ oplossing:

$$\frac{m}{2\pi\hbar^2 a_s} = - \int \frac{d^3k}{(2\pi)^2} \left[\frac{\Theta(E_k - \zeta)}{E_k} - C \right] \quad (6.12)$$

De renormalisatie zal niet veranderen en dus wordt nog steeds (5.29) gebruikt. Het enige dat dus verandert in de bandkloofvergelijking is dat er een Heaviside thetalfunctie bijkomt. Merk op dat als de ongelijkheid in spinpopulatie ζ kleiner is dan de bandkloof Δ , de Heaviside thetalfunctie steeds voldaan is en er dan dezelfde resultaten komen als in het vorige hoofdstuk. Dat wil zeggen dat er pas een effect van de ongelijkheid is vanaf $\zeta > \Delta$. Dit is de zogenaamde Clogston drempel [20]. Voor al het overige wordt er dezelfde procedure gevolgd als in het voorgaande hoofdstuk. In de komende sectie worden de resultaten bijeengezet en besproken.

6.3 Resultaten

Zoals in het vorige hoofdstuk zal een driedimensionale afbeelding van de oplossingen van de bandkloofvergelijking worden weergegeven. Dit is berekend voor een voorafbepaalde waarde van ζ .



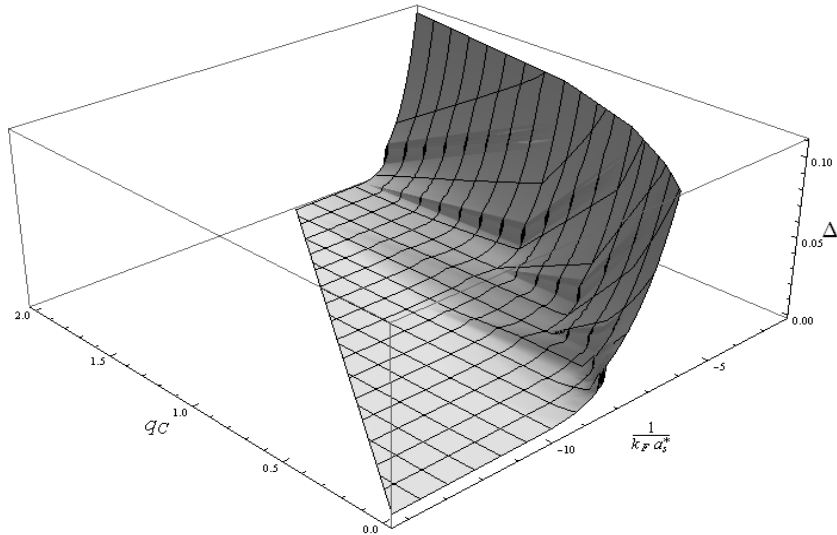
Figuur 6.4: Op deze figuur is (6.11) uitgezet voor $E_k < \zeta$, $E_k = \zeta$, $E_k > \zeta$.

Hier is een vooraf gekozen waarde voor ζ ingevoerd. In een experimentele realisatie is het echter het verschil in deeltjes dat men vastlegt. Om dit in te voeren moet de zogenaamde number equation worden opgelost. Deze number equation vindt men door de vrije energie Ω te minimaliseren naar het verschil in deeltjes, δn . Hierin kan dan de gekozen waarde van δn worden ingevuld en zo bekomt men een waarde voor ζ waarvoor de bandkloofvergelijking kan worden opgelost.

Er kan nu voor verschillende waarden van q_C afzonderlijk worden gekeken. Voor elk van die waarden zal de bandkloofvergelijking opgelost worden voor vier waarden van ζ . Er zal ook worden vergeleken met de berekeningen van het vorige hoofdstuk als controle. De waarden van ζ zijn 0, 0,005, 0,010, 0,015. Op figuur 6.6 is dit uitgezet voor $q_C = 10$. Er valt op dat wanneer ζ verschilt van nul, de oplossing van de bandkloof voor kleine Δ naar een eindige waarde voor $1/k_F a_s^*$ gaat. Op figuren 6.7 en 6.8 is deze trend ook te zien voor $q_C = 1$ en $q_C = 0,1$. Dit betekent dat voor een bepaalde interactiesterkte er een ζ bestaat waarvoor de bandkloofvergelijking geen oplossing heeft. Omgekeerd geldt dat bij een gekozen ζ een kritische interactie sterkte hoort.

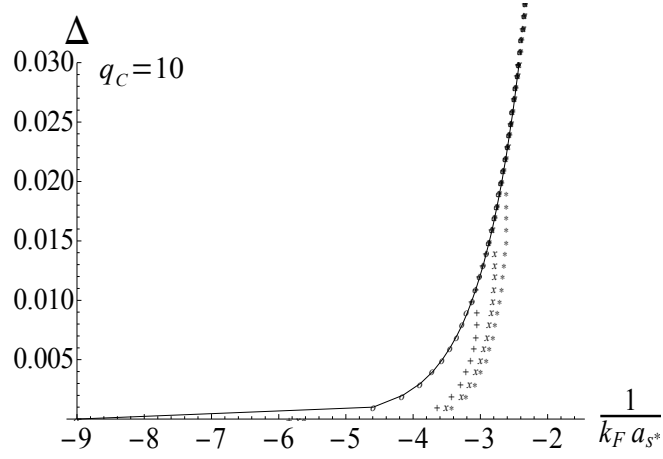
Op de figuren valt op dat de afwijking van de situatie zonder ongelijkheid in spincomponenten zich manifesteert wanneer de bandkloof Δ gelijk wordt aan de ongelijkheid. Op dit moment treedt de Heaviside thetastuctie in werking.

De kritische interactiesterkte als functie van q_C en ζ wordt getoond in figuur 6.9. Er valt op dat bij kleine verschillen in chemische potentiaal de kritische interactiesterkte zeer sterk omhoog gaat. Dit betekent dat er voor kleine ζ er voor elke interactiesterkte een oplossing kan gevonden worden. Er valt ook op dat naar het meer relativistische regime toe er een hogere kritische interactie sterkte is. Dus er is een grotere range van interactiesterktes die een oplossing geven voor de bandkloofvergelijking. Want elke interactiesterkte die onder de kritische ligt, onder op de figuur, zal een oplossing geven voor de bandkloofver-

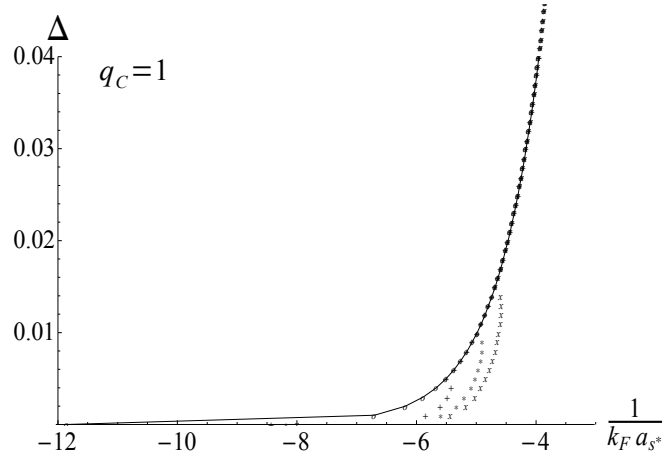


Figuur 6.5: De oplossingen voor de bandkloofvergelijking voor een Fermigas met een ongelijke chemische potentiaal tussen spin-op en spin-neer deeltjes. De waarde van ζ bedraagt 0,02.

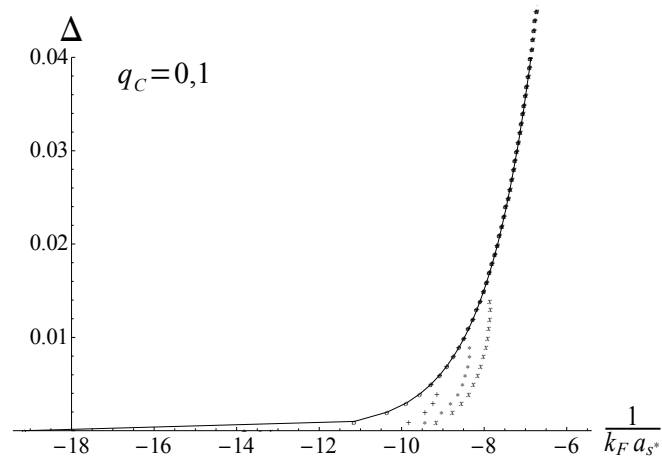
gelijking. $1/k_F a_s^*$ dient wel kleiner dan nul te blijven want anders komt men in het BEC regime. Dit regime kan bestudeerd worden wanneer men de chemische potentiaal niet meer gelijk neemt aan de Fermi-energie maar deze berekent aan de hand van een number equation. Deze kan gevonden worden door de vrije energie te minimaliseren naar het totaal aantal deeltjes. Deze vergelijking moet simultaan met de bandkloofvergelijking opgelost worden.



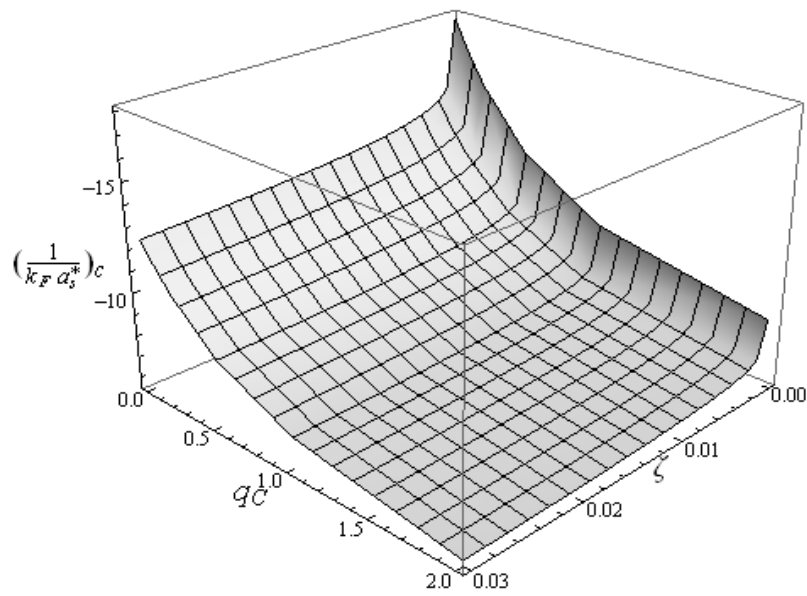
Figuur 6.6: De oplossing van de bandkloofvergelijking voor verschillende waarden van ζ : 0 (o), 0,005 (+), 0,010 (*), 0,015 (x). De volle lijn stelt de berekening zoals gedaan in vorig hoofdstuk voor. Dit allen is berekend voor een $q_C = 10$.



Figuur 6.7: De oplossing van de bandkloofvergelijking voor verschillende waarden van ζ : 0 (o), 0,005 (+), 0,010 (*), 0,015 (x). De volle lijn stelt de berekening zoals gedaan in vorig hoofdstuk voor. Dit allen is berekend voor een $q_C = 1$.



Figuur 6.8: De oplossing van de bandkloofvergelijking voor verschillende waarden van ζ : 0 (o), 0,005 (+), 0,010 (*), 0,015 (x). De volle lijn stelt de berekening zoals gedaan in vorig hoofdstuk voor. Dit allen is berekend voor een $q_C = 0,1$.



Figuur 6.9: De kritische interactiesterkte als functie van q_C en ζ .

Hoofdstuk 7

Conclusie

In dit werk werd onderzocht wat de effecten zijn van het inbrengen van een relativistische dispersie in een Bose-Einsteincondensaat of in de theorie van Bardeen-Cooper-Schrieffer.

Vanuit een klassieke beschrijving kan worden geconcludeerd dat bij grote temperaturen een relativistische beschrijving nodig is. De relativistische beschrijving beperkt zich tot het gebruik van een relativistische dispersie voor de kinetische energie. Dit was uitgewerkt in hoofdstuk 3.

De aanpak om de kinetische energiedispersie relativistisch te maken is met succes toegepast op de berekening van de kritische temperatuur van het Bose-Einstein condensaat in hoofdstuk 4. Deze kritische temperatuur werd als functie van de dichtheid berekend door de het aantal deeltjes in de grondtoestand af te schatten. Er werd aangetoond dat wanneer de dichtheid van de deeltjes van de orde van één deeltje per Comptonvolume is, dat dan de kritische temperatuur afwijkt van het niet-relativistische resultaat. De bijhorende kritische temperatuur wordt dan van de orde van de rustmassa van de deeltjes.

Vervolgens is de BCS theorie bestudeerd. Het invoeren van een relativistische dispersie heeft als gevolg dat de standaard gebruikte renormalisatie voor atomaire BCS superfluida niet meer kon worden toegepast. Er is een voorstel gedaan tot het uitbreiden van de renormalisatie met een term die overeenkomt met het Fermi-energieniveau van het systeem.

Er is een extra parameter ingevoerd die voorstelt wat de verhouding is tussen de Fermigolfvector en de Comptongolfengte. Wanneer de Fermigolfvector kleiner is dan de Comptongolfengte dan zijn is het voldoende om een niet relativistische beschrijving te gebruiken. Wanneer ze echter vergelijkbaar worden dan is het noodzakelijk om een relativistische dispersie in te voeren.

De bandkloofvergelijking is opgesteld in het algemene geval en de renormalisatie is analytisch berekend.

Er is ook een analytische uitdrukking bekomen voor de limiet naar het extreem relativistische regime. In deze limiet wordt de kinetische energie dispersie lineair. De bandkloofvergelijking is numeriek opgelost en vergeleken met de bekende limieten.

Uit de oplossing van de bandkloofvergelijking valt op dat in het meer relativistische regime de gerenormaliseerde interactiesterkte groter is in vergelijking

met het niet-relativistische regime voor dezelfde bandkloof. Een mogelijke verklaring is dat in het relativistische regime de deeltjes een hogere energie hebben en hierdoor moeilijker binden. Om toch een bandkloof te vinden zoals in het niet-relativistische regime, lagere energieën, moet er een sterkere aantrekkende interactie zijn.

Er werd ook onderzocht wat het effect op de bandkloofvergelijking is van het invoeren van een verschil in chemische potentiaal tussen spin-op en spin-neer deeltjes. Dit leidt tot een kritische interactiesterkte. Wanneer de Fermi-energie van de beide componenten die gaan binden in Cooperparen te veel verschilt, zal de superfluiditeit onderdrukt worden. Er is berekend dat voor een relativistische dispersie er een hogere kritische interactiesterkte gevonden wordt. Dit betekent dat er voor een grote gebied van interactiesterkte er een oplossing bestaat voor de bandkloofvergelijking en er dus superfluiditeit of supergeleiding kan plaatsvinden.

Bibliografie

- [1] Bose; S.N., *Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese*, Zeitschrift für Physik **26** (1924), no. 178.
- [2] A. Einstein, *Quantentheorie des einatomigen idealen Gases*, Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften **1** (1925), no. 3.
- [3] 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*, Physical Review Letters **75** (1995), no. 22, 3969–3973.
- [4] M.H. Anderson, J.R. Ensher, M.R. Matthews, C.E. Wiemann, and E.A. Cornell, Science **269** (1995), 198–201.
- [5] http://cua.mit.edu/ketterle_group/Popular_papers/Ultralow_temperatures.htm, webpagina's van Ketterle et al.
- [6] J. Bardeen, L.N. Cooper, and J.R. Schrieffer, *Microscopic Theory of Superconductivity*, Physical Review **106** (1957), no. 1, 162–164.
- [7] J. Bardeen, L.N. Cooper, and J.R. Schrieffer, *Theory of Superconductivity*, Physical Review **108** (1957), no. 5, 1175–1204.
- [8] J. Tempère, W. Casteels, M.K. Oberthaler, E. Knoop, E. Timmermans, and J.T. Devreese, *Feynman path-integral treatment of the BEC-impurity polaron*, Physical Review B **80** (2009), no. 184504.
- [9] Lih-King Lim, Andreas Hemmerich, and C. Morais Smith, *Artificial staggered magnetic field for ultracold atoms in optical lattices*, Physical Review A **81** (2010), no. 023404.
- [10] David Pines and M. Ali Alpar, *Superfluidity in neutron stars*, Nature **316** (1985), no. 4, review artikel.
- [11] M. Alford, C. Kouvaris, and K. Rajagopal, *Gapless Color-Flavor-Locker Quark Matter*, Physical Review Letters **92** (2004), no. 22, 222001.
- [12] A. Sedrakian and U. Lombardo, *Thermodynamics of a n-p Condensate in Asymmetric Nuclear Matter*, Physical Review Letters **84** (2000), no. 4, 602–605.
- [13] F. Brosens, *Kwantummechanica II*, Cursus aan de UA, 2008-2009.
- [14] Francesca Maria Marchetti, *Superfluidity in Ultracold Fermi Gases*, Nota's bij Cursus aan de Universiteit van Oxford, september 2007.

- [15] F. Jüttner, *Annalen der Physik* **34** (1911), 856–882.
- [16] *Maxwell-Boltzmann distribution*, Wikipedia-English.
- [17] Jacques Tempère, *Theoretische fysica VII: statistische fysica*, Cursus aan de UA, 2007-2008.
- [18] M. Grether, M. de Llano, and G.A. Baker Jr., *Bose-Einstein Condensation in the Relativistic Ideal Bose Gas*, *Physical Review Letters* **99** (2007), no. 20.
- [19] *Neutron Star*, Wikipedia-English.
- [20] A.M. Clogston, *Upper Limit for the Critical Field in Hard Superconductors*, *Physical Review Letters* **9** (1962), 266–267.