

Квантна статистичка физика

М.В. Миловановић

Увод	
1. Идентичне честице и друга квантизација.....	6
(А) Идентичне честице	
(Б) Репрезентација попуњености	
(В) Оператори у другој квантизацији	
2. Статистички оператор.....	25
(А) Матрица густине	
(Б) Статистички оператор	
3. Идеални Бозе и Ферми гасови.....	34
(А) Увод	
(Б) Идеални Бозе гас	
(В) Идеални Ферми гас	
4. Ферми системи и интеракције.....	54
(А) Разређени Ферми гас	
(Б) Хартри-Фок метода	
(В) Магнетизам	
5. Суперфлуидност.....	72
(А) Разређени Бозе гас	
(Б) Спонтано нарушење симетрије	
(В) Грос-Питаевски једначина	
(Г) Фонони	
(Д) Суперфлуидност	
(Ђ) Вортексне ексцитације	

6. Суперпроводност.....	93
(А) Особине	
(Б) Гинзбург-Ландау опис	
(В) Куперов пар	
(Г) БКШ теорија	

Литература:

- (1) *Landau, Lifshitz, Statistical Physics I, II*
- (2) *Annett, Superconductivity, Superfluids and Condensates*

Помоћна литература:

- (1) *Feynman, Statistical Physics*
- (2) *Ashcroft, Mermin, Solid State Physics*
- (3) *Fetter, Walecka, Quantum Theory of Many-Particle Systems*
- (4) *Stone, The Physics of Quantum Fields*

УВОД

Квантна статистичка физика (КСФ) описује статистичке, најчешће многочестишне системе узимајући у обзир постулате квантне механике (КМ). КСФ је важна за разумевање и опис макроскопских физичких система: од материјала (нпр. метала) до појава (нпр. еволуција звезда) у космосу. Статистичка физика описује класичне макроскопске системе које због њихове величине и комплексности карактерише непознавање информације која је у принципу доступна. КСФ подразумева опис система у коме постоји инхерентна недоступност информације – система у реалном свету за чији опис је неопходна КМ.

У овим белешкама је дат сажет приказ принципа КСФ са основним примерима физичких система за чији је опис у домену ниских температура неопходан прилаз КСФ.

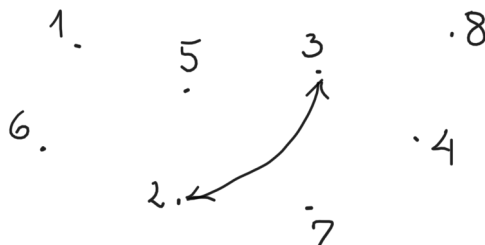
Градиво је распоређено у шест поглавља. У Поглављу 1., Идентичне честице и друга квантизација, обнављамо основни постулат КМ за опис система идентичних честица и математички оквир (= „друга квантизација“) за њихов опис. У Поглављу 2. уводимо појам матрице густине и статистичког оператора. Уобичајени прилаз КМ је да изолујемо једночестишни проблем (нпр. хармонијски осцилатор) и налазимо стационарна својствена стања система. Сваки реалан систем је увек подсистем и захтева уопштење описа путем посебног оператора у Хилбертовом простору тзв. матрице густине која описује стање система. Велики и комплексни системи би захтевали огромне матрице густине и зато је неопходан статистички прилаз. Зато, да би добили одговоре (пре свега) на глобална – термодинамичка питања, уводимо једну редукцију (блиску класичном статистичком прилазу) матрице густине у тзв. статистички оператор. У Поглављу 3., Идеални Бозе и Ферми гасови, проучавамо основне системе КСФ које чине неинтереагујуће идентичне честице, које се сударима (интеракијама) са околином термализују. Изразит КМ макроскопски феномен Бозе система је Бозе-Ајнштајн кондензација (БАК) када се честице на ниским температурама групишу, макроскопски попуњавају једно – најниже енергије (једночестишно) стање. Поглавље 4. је посвећено разређеним Ферми системима који слабо интерагују и које можемо разматрати пертурбационим методама и методама средњег поља. Осврнућемо се и на јако интерагујуће фермионе - електроне и појаву магнетизма, у коме доминантни

допринос даје спински степен слободe електрона. У Поглављу 5. упознаћемо суперфлуидност – макроскопски феномен који се заснива на БАК и у коме систем честица, у присуству међусобних интеракција, постаје изразито ригидан – понаша се као ригидна целина која се тешко ексцитује. Системи идентичних честица, тзв. квантне течности, који су суперфлуидни карактерише појава тока без отпора, без трења о зидове суда или у унутрашњости течности. У Поглављу 6., Суперпроводност, упознаћемо тзв. наелектрисане суперфлуиде, системе који проводе електричну струју без отпора. У основи и ове појаве је БАК ефективних бозона; ефективни бозони су парови фермиона – електрона тзв. Куперови парови. Ригидност суперфлуидног и суперпроводног система може се описати и кроз њихов одзив – опирање успостављању ротације (кружног тока, магнетног поља) у систему, јер би то повлачило ротацију система као целине. За основно разумевање ових система разматраћемо слабо интерагујуће системе примењујући апроксимацију средњег поља (Богољубовљево решење за разређени Бозе гас и БКШ (*Bardeen-Cooper-Schrieffer*) опис суперпроводника). Суперфлуидност и суперпроводност карактеришу посебне термодинамичке фазе материје и да би их боље упознали разматраћемо феномен спонтаног нарушења симетрије и карактеризацију таквих фаза на начин комплексног параметра уређења у Поглављу 5.

1. Идентичне честице и друга квантизација

(А) Идентичне честице

Замислимо необично биће (Максвелов демон) који зна све координате и импулсе $\{(\vec{r}_1, \vec{p}_1), (\vec{r}_2, \vec{p}_2), \dots, (\vec{r}_N, \vec{p}_N)\}$, N честица истог типа:



1.1

Класично ако заменимо положаје и импулсе било ког пара честица, (нпр. $2 \leftrightarrow 3$), систем је у новом стању – тачки у фазном простору. По принципима КМ измена идентичних честица не доводи до новог квантног стања.

Разматрајмо две такве – идентичне честице које су описане таласном функцијом $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$. Ако заменимо њихове положаје $\vec{r}_1 \leftrightarrow \vec{r}_2$ добијамо исто стање које можемо описати истом таласном функцијом до на могућу фазу:

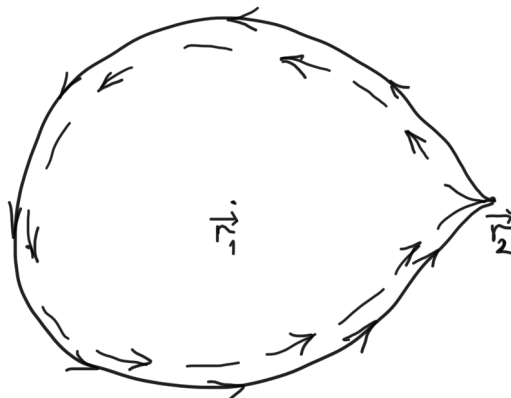
$$E_{12} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = e^{i\alpha} \Psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1).$$

Ако поновимо операцију измене долазимо на почетни опис у датој репрезентацији проблема који мора бити идентичан полазном опису:

$$E_{12}^2 \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2).$$

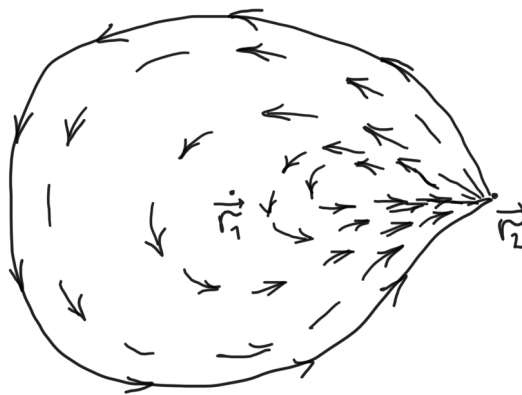
У овом задњем кораку применили смо правило КМ за нерелативистичке честице – да њихов опис је увек дат преко једнозначних функција. (Нпр. у две димензије са комплексним координатама $z = x + iy$, $\bar{z} = x - iy$, не можемо имати $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \sim \sqrt{z_1 - z_2}$.) Дакле $E_{12}^2 = 1$ тј. могуће вредности измене су $E_{12} = 1$ ($\alpha = 0$) у случају бозонских честица и $E_{12} = -1$ ($\alpha = \pi$) у случају фермионских честица.

Ово је једноставан математички аргумент али је могућа интерпретација (могуће је доћи до одређења статистике) преко фазе које честица (физички) акумулира обилазећи другу честицу и враћајући се у почетан положај. (Посматрамо измену преко релативног кретања две честице.)



1.2

Ако мало деформишемо путању (1 \rightarrow 2 у одсуству других честица) ништа значајно тополошки (као драстична промена) неће се догодити. Конкретно, у три (просторне) димензије, можемо да опишемо путање у екстра (трећој) димензији и избегнемо судар са другом честицом:

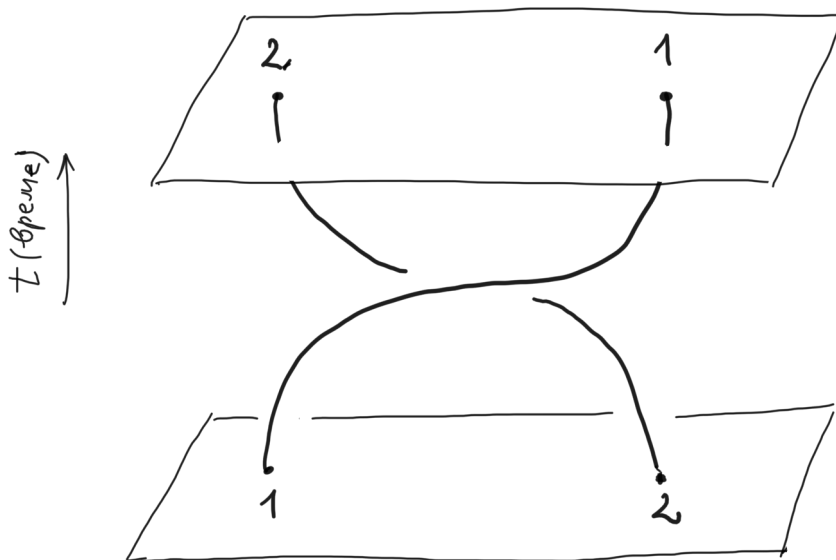


1.3

Дакле (у три димензије) путања 1 са двоструком изменом је еквивалентна изостанку обилажења и то је у сагласности са претходним аргументом: у три димензије могућа је бозонска и фермионска статистика.

У две димензије није могуће деформисати путању 1 без судара са честицом у \vec{r}_1 . Због тога можемо имати тзв. фракциону статистику јер фаза φ , дефинисана за општи случај: $E_{12}^2 = e^{i\varphi}$, може бити $\varphi \in [0, 2\pi)$. Ипак, у случају фундаменталних, градивних честица као што су електрони у металу или атоми Не (хелијума), важи принцип једнозначности таласних функција и такве честице (честице које могу постојати само у вакууму) могу бити само бозонске или фермионске статистике и у (ефективно) дводимензионалним системима. Али колективне ексцитације неких система („квaziчестице“) могу да имају тзв. ањонску статистику тј. произвољно φ .

Прецизно разматрање статистике у КМ може се дати преко *Feynman path* интеграла тј. разматрањем и класификовањем путања честица налик нашим претходним разматрањима. У општем случају, у три димензије, стања система N честица представљају могуће репрезентације пермутационе групе S_N ($E_{12}^2 = 1$), док у две димензије, то су репрезентације “braid” групе B_N ($E_{12}^2 = e^{i\varphi}$) где под E_{12} подразумевамо „бод у плетењу“:



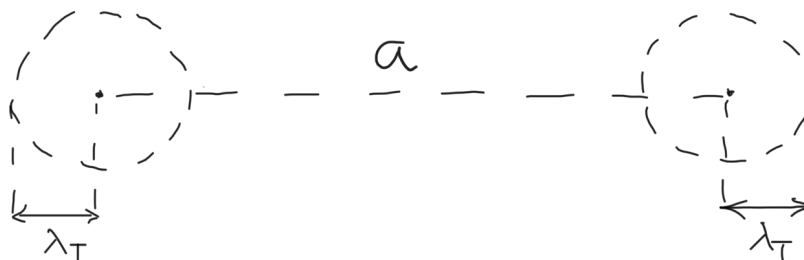
Када је неопходно узети у обзир идентичност честица на начин КМ, када је неопходна КСФ? Да би мотивисали критеријум везан за λ_T – термалну (*de Broglie* таласну) дужину користићемо се визуром (погледом) на систем честица у коме неодређеност координате r_i^α и импулса p_i^α честице i , где $\alpha = x, y, z$, задовољавају релацију $(\Delta r_i^\alpha) (\Delta p_i^\alpha) \sim \hbar$, тј. опис је максимално могуће близак класичном опису (кохерентна стања честице у хармонијској замци честице итд.) али ограничен КМ-ом. Ако проценимо (Δp_i) као само p_i које опет само проценимо преко вредности карактеристичне термалне енергије тј. $\frac{p^2}{2m} \sim k_B T$, добијамо оцену карактеристичне дужине (димензије) честице тј. термалне дужине,

$$\lambda_T \sim \frac{1}{\sqrt{m T}}.$$

У разматрањима идеалних и њима блиских система λ_T можемо упоредити са

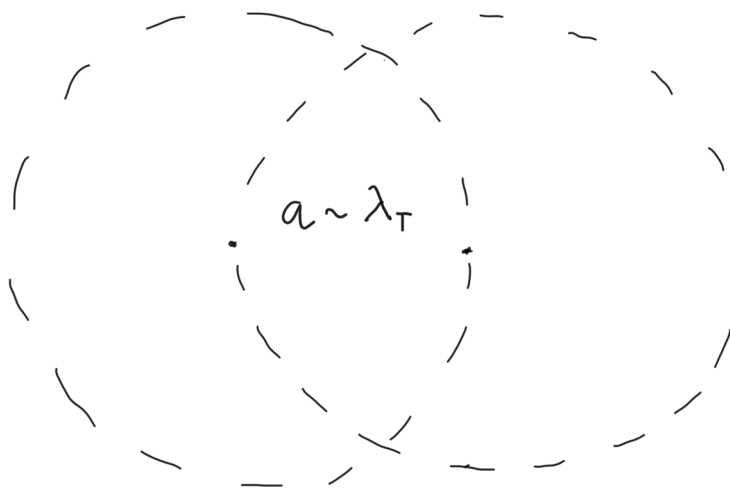
$$a = \left(\frac{V}{N}\right)^{\frac{1}{3}},$$

средњим растојањем међу честицама. Када смо у класичном режиму $a \gg \lambda_T$:



(где λ_T карактерише размазаност, недоступност информације о положају честице).

Када смо на преласку у квантни режим (у критичном режиму):



1.6

Даљим снижавањем температуре, додавањем честица итд. прелазимо у квантни режим.

Како можемо описати систем од N истоветних честица у квантном режиму? Полазимо од Хилбертовог простора $\mathcal{H}(N)$ за N честица исте врсте,

$$\mathcal{H}(N) = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}_N,$$

где $\{\mathcal{H}_i, i = 1, 2, \dots, N\}$ означавају међусобно исте једночестичне Хилбертове просторе. Разматрајмо стања у различивом опису (слици) која се могу представити као

$$|\Psi_1\rangle_1 \times |\Psi_2\rangle_2 \times \cdots \times |\Psi_N\rangle_N,$$

тј. као директни производ једночестичних стања сваке честице. У неразличивој (КМ) слици овим стањима одговарају следећа стања у које смо уградили (анти)симетричност на измену стања било које две честице:

$$|\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{P \in S_N} \zeta^P |\Psi_{P(1)}\rangle_1 \times |\Psi_{P(2)}\rangle_2 \times \dots \times |\Psi_{P(N)}\rangle_N,$$

где P означава пермутацију од N елемената, $P \in S_N$, и сума је по свим могућим пермутацијама. За бозоне треба узети $\zeta = 1$ а за фермионе $\zeta = -1$ и P је у ζ^P број измена или транспозиција који карактеришу одређену пермутацију. У случају фермиона $\zeta^P = (-1)^P = \text{sgn } P$ тј. $\text{sgn } P$ је знак (парност) пермутације.

У случају бозона оваква стања називамо „перманенте“ и она представљају тривијалне репрезентације S_N а у случају фермиона оваква стања називамо „детерминанте“ и она представљају алтернирајуће (такође једнодимензионе) репрезентације S_N .

Због антисиметричности описа фермиона било која два стања у $|\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_N\rangle$ не могу бити иста.

Разматрајмо нормализацију стања $|\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_N\rangle$. Може се показати да

$$\begin{aligned} & \langle \varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_N | \Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_N \rangle \\ &= \sum_P \zeta^P \langle \varphi_1 | \Psi_{P(1)} \rangle \langle \varphi_2 | \Psi_{P(2)} \rangle \dots \langle \varphi_N | \Psi_{P(N)} \rangle \\ &= \left| \begin{array}{ccc} \langle \varphi_1 | \Psi_1 \rangle & \dots & \langle \varphi_1 | \Psi_N \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \varphi_N | \Psi_1 \rangle & \dots & \langle \varphi_N | \Psi_N \rangle \end{array} \right|_{\zeta} \quad (= \text{транспонована}). \end{aligned}$$

Доказ: Следећи дефиниције и зато што радимо са идентичним Хилбертовим просторима $\langle \quad \rangle_i = \langle \quad \rangle$ можемо разматрати

$$\begin{aligned} & \langle \varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_N | \Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_N \rangle \\ &= \frac{1}{N!} \sum_{Q,R} \zeta^Q \zeta^R \langle \varphi_{Q(1)} | \Psi_{R(1)} \rangle \dots \langle \varphi_{Q(N)} | \Psi_{R(N)} \rangle. \end{aligned}$$

Парови $\langle \varphi_{Q(n)} | \Psi_{R(n)} \rangle$ дефинишу пермутацију која $Q(n)$ додељује $R(n)$ тј. ако је „упростојимо“ сваком n додељује $Q^{-1}R(n)$ (прво R па онда Q^{-1}) и ако искористимо да $\zeta^Q \zeta^R = \zeta^{Q^{-1}R} = \zeta^{Q^{-1}R}$ следи да

$$\begin{aligned} & \langle \varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_N | \Psi_1, \Psi_2 \dots, \Psi_N \rangle \\ &= \frac{1}{N!} \sum_{Q,R} \zeta^{Q^{-1}R} \langle \varphi_1 | \Psi_{Q^{-1}R(1)} \rangle \dots \langle \varphi_N | \Psi_{Q^{-1}R(N)} \rangle. \end{aligned}$$

Користимо да је у горњем изразу $\Sigma_R = \Sigma_{Q^{-1}R} = \Sigma_P$ и $(\frac{1}{N!} \Sigma_Q) = 1$ и добијамо тражену једнакост.

У случају два бозона у истом стању $|\Psi_1\rangle = |\Psi_2\rangle = |\Psi\rangle$ и нека $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$ следи да

$$\langle \Psi, \Psi | \Psi, \Psi \rangle = \begin{vmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{vmatrix}_+ = 2!,$$

тј. нормирано стање је $\frac{|\Psi, \Psi\rangle}{\sqrt{2!}} = |\Psi\rangle \times |\Psi\rangle$. Ако имамо три бозона у истом стању

$$\langle \Psi, \Psi, \Psi, | \Psi, \Psi, \Psi \rangle = \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{vmatrix}_+ = 3! \text{ итд.}$$

Претпоставимо ортонормиран базис у \mathcal{H} (једночестичном Хилбертовом простору):

$$\{|\alpha_i\rangle; i = 1, 2, \dots; \langle \alpha_i | \alpha_k \rangle = \delta_{i,k}\}.$$

Уколико $|\alpha_{(1)} \dots \alpha_{(i)} \dots \alpha_{(N)}\rangle$ је бозонско стање са n различитих једночестичних стања са индексом k тј. $\sum_{k=1}^n n_k = N$, следи да је одговарајуће нормирано стање облика

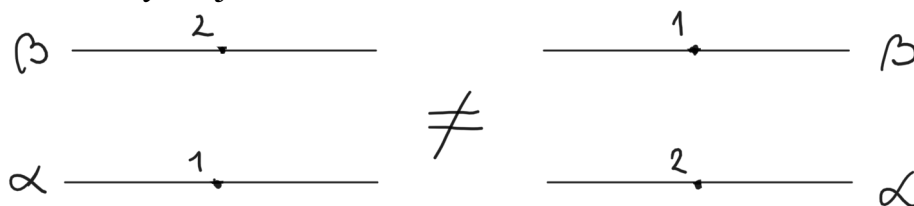
$$\frac{1}{\sqrt{\prod_{k=1}^n n_k!}} |\alpha_{(1)} \dots \alpha_{(i)} \dots \alpha_{(N)}\rangle.$$

Уколико $|\alpha_{(1)} \dots \alpha_{(i)} \dots \alpha_{(N)}\rangle$ је фермионско стање, сва једночестична стања су различита и само стање је већ нормирано и представља тзв. *Slater* детерминанту.

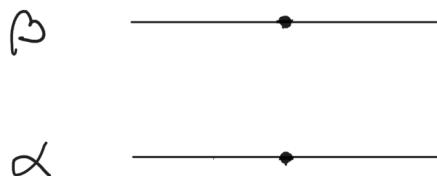
(Б) Репрезентација попуњености

Репрезентација попуњености је важна јер њеним коришћењем можемо избећи запис на начин гломазних таласних функција са огромним, фиксираним бројем честица. Такође она је основа за тзв. „другу квантизацију“ у којој ће запис проблема у КСФ тј. опис оператора бити једноставнији.

Ако занемаримо идентичност, неразличивост честица у КМ за два стања $|\alpha\rangle$ и $|\beta\rangle$ (класично) имамо две могућности да их попуњимо са две честице тако да је у сваком стању по једна честица:



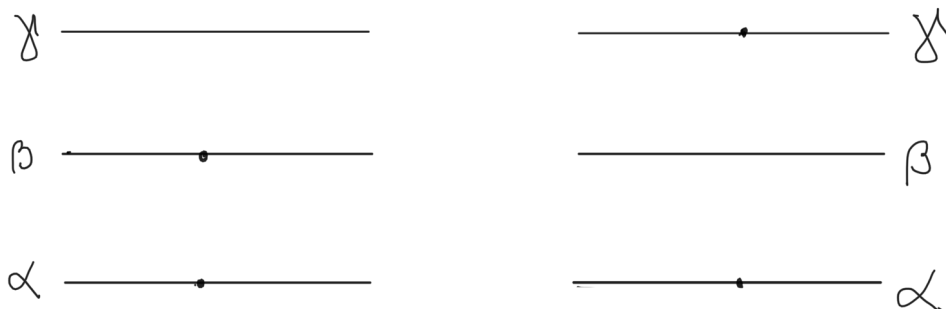
ДОК КВАНТНО:



1.7

Исказ о попуњености је довољан да опише стање.

Ако користимо попуњеност као опис стања увиђамо неопходност да радимо у простору са различитим бројем честица, чак и ако систем карактерише одређен број честица. Нпр. да би описали прелаз:



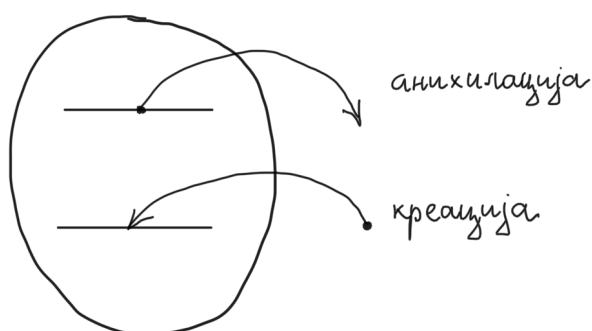
1.8

неопходна је „аниhilација“ (уклањање) честица у стању β и „креирање“ у стању γ . Дакле потребан је тзв. Фоков простор у коме произвољно стање $|\Psi\rangle$ може да се представи као суперпозиција стања са различитим бројем честица,

$$|\Psi\rangle = |\Psi\rangle^{(0)} + |\Psi\rangle^{(1)} + |\Psi\rangle^{(2)} + \dots + |\Psi\rangle^{(M)} + \dots$$

Стање $|\Psi\rangle^{(M)}$ представља стање са M честица и важи

$$\langle\Psi|^{(M)}|\Psi\rangle^{(L)} \sim \delta_{M,L}.$$



1.9

Како на језику оператора представљамо креацију и аниhilацију? Размотрићемо њихово могуће деловање на претходно уведена стања $|\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_N\rangle$. Природно креацију честице у једночестичном стању $|\varphi\rangle$ можемо дефинисати задавши деловање оператора a_φ^\dagger као

$$a_\varphi^\dagger |\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_N\rangle = |\varphi, \Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_N\rangle.$$

Шта би представљало аниhilацију честице у истом стању? Да ли би то био адјунгован оператор оператору a_φ^\dagger , које би обележавали са a_φ слично ситуацији коју имамо за обични хармонијски осцилатор? Ако разматрамо очекиване вредности у односу на векторе у Фоковом потпростору V_{N-1} , са $N-1$ честица у који би такав оператор пресликавао произвољно $|\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_N\rangle$ и применимо дефиницију адјунговања долазимо до добро дефинисаног оператора:

$$\begin{aligned}
& \langle \varphi_1, \varphi_2 \dots, \varphi_{N-1} | a_\varphi | \Psi_1, \Psi_2 \dots, \Psi_N \rangle \\
&= \langle \Psi_1, \Psi_2 \dots, \Psi_N | a_\varphi^\dagger | \varphi_1, \varphi_2 \dots, \varphi_{N-1} \rangle^* \\
&= \left| \begin{array}{ccc} \langle \Psi_1 | \varphi \rangle & \langle \Psi_1 | \varphi_1 \rangle & \dots \langle \Psi_1 | \varphi_{N-1} \rangle \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \langle \Psi_N | \varphi \rangle & \langle \Psi_N | \varphi_1 \rangle & \dots \langle \Psi_N | \varphi_{N-1} \rangle \end{array} \right|_\zeta^* \\
&= \left| \begin{array}{ccc} \langle \varphi | \Psi_1 \rangle & \langle \varphi_1 | \Psi_1 \rangle & \dots \langle \varphi_{N-1} | \Psi_1 \rangle \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \langle \varphi | \Psi_N \rangle & \langle \varphi_1 | \Psi_N \rangle & \dots \langle \varphi_{N-1} | \Psi_N \rangle \end{array} \right|_\zeta \\
&= \sum_{i=1}^N \langle \varphi | \Psi_i \rangle \zeta^{i-1} \left| \begin{array}{ccc} \langle \varphi | \Psi_1 \rangle & \dots & \langle \varphi_{N-1} | \Psi_1 \rangle \\ \vdots & no \Psi_i & \vdots \\ \langle \varphi | \Psi_N \rangle & \dots & \langle \varphi_{N-1} | \Psi_N \rangle \end{array} \right|_\zeta.
\end{aligned}$$

Дакле

$$a_\varphi | \Psi_1, \Psi_2 \dots, \Psi_N \rangle = \sum_{i=1}^N \langle \varphi | \Psi_i \rangle \zeta^{i-1} | \Psi_1, \dots, no \Psi_i \dots, \Psi_N \rangle.$$

Примењујући дефиницију a_φ^\dagger можемо закључити

$$[a_\varphi^\dagger, a_{\tilde{\varphi}}^\dagger]_{-\zeta} = 0, \text{ и адјунгујући ову релацију}$$

$$[a_\varphi, a_{\tilde{\varphi}}]_{-\zeta} = 0.$$

Поново примењујући дефиниције

$$a_{\tilde{\varphi}}^\dagger a_\varphi | \Psi_1, \Psi_2 \dots, \Psi_N \rangle = \sum_{i=1}^N \langle \varphi | \Psi_i \rangle \zeta^{i-1} | \tilde{\varphi}, \Psi_1, \dots, no \Psi_i \dots, \Psi_N \rangle,$$

$$\begin{aligned}
a_\varphi a_{\tilde{\varphi}}^\dagger | \Psi_1, \Psi_2 \dots, \Psi_N \rangle &= a_\varphi | \tilde{\varphi}, \Psi_1, \dots, \Psi_N \rangle \\
&= \langle \varphi | \tilde{\varphi} \rangle + \sum_{i=1}^N \langle \varphi | \Psi_i \rangle \zeta^i | \tilde{\varphi}, \Psi_1, \dots, no \Psi_i \dots, \Psi_N \rangle.
\end{aligned}$$

Дакле за

$$\zeta = 1 \Rightarrow a_\varphi a_{\tilde{\varphi}}^\dagger - a_{\tilde{\varphi}}^\dagger a_\varphi = [a_\varphi, a_{\tilde{\varphi}}^\dagger] = \langle \varphi | \tilde{\varphi} \rangle,$$

$$\zeta = -1 \Rightarrow a_\varphi a_{\tilde{\varphi}}^\dagger + a_{\tilde{\varphi}}^\dagger a_\varphi = \{a_\varphi, a_{\tilde{\varphi}}^\dagger\} = \langle \varphi | \tilde{\varphi} \rangle.$$

Ако користимо једночестични базис,

$$\{|\alpha_i\rangle; i = 1, 2, \dots; \langle \alpha_i | \alpha_k \rangle = \delta_{i,k}\},$$

у репрезентацији попуњености базисна стања система бозона су:

$$|n_1 \ n_2 \ \dots\rangle = \frac{|\alpha_1 \alpha_1 \dots \alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_2 \dots\rangle}{\sqrt{n_1!} \sqrt{n_2!} \dots} \quad \text{у којима је } n_i \text{ произвољно,}$$

и креациони и анихилациони оператори делују

$$a_i |n_1 \ n_2 \ \dots n_i \ \dots\rangle = \sqrt{n_i} |n_1 \ n_2 \ \dots (n_i - 1) \ \dots\rangle,$$

јер имамо n_i анихилација и

$$a_i^\dagger |n_1 \ n_2 \ \dots n_i \ \dots\rangle = \sqrt{n_i + 1} |n_1 \ n_2 \ \dots (n_i + 1) \ \dots\rangle,$$

и стања фермиона:

$|n_1 \ n_2 \ \dots\rangle$ где $\forall i, n_i = 1 \vee n_i = 0$ и оператори делују

$$a_i |n_1 \ n_2 \ \dots n_i \ \dots\rangle = \delta_{n_i,1} (-1)^{\sum_{k=1}^{i-1} n_k} |n_1 \ n_2 \ \dots (n_i = 0) \ \dots\rangle,$$

$$a_i^\dagger |n_1 \ n_2 \ \dots n_i \ \dots\rangle = \delta_{n_i,0} (-1)^{\sum_{k=1}^{i-1} n_k} |n_1 \ n_2 \ \dots (n_i = 1) \ \dots\rangle.$$

Помоћу креационих оператора можемо изразити ове базисе у Фоковом простору:

$$\text{бозони: } \frac{(a_{\alpha(1)}^\dagger)^{n_1}}{\sqrt{n_1!}} \frac{(a_{\alpha(2)}^\dagger)^{n_2}}{\sqrt{n_2!}} \dots \frac{(a_{\alpha(n)}^\dagger)^{n_n}}{\sqrt{n_n!}} |0\rangle,$$

фермиони: $a_{\alpha(1)}^\dagger a_{\alpha(2)}^\dagger \cdots a_{\alpha(n)}^\dagger |0\rangle$.

Базисна стања $\{|\alpha_i\rangle\}$ често бирамо као стања импулса $\{|\vec{p}\rangle\}$ или координате $\{|\vec{r}\rangle\}$ слободне честице. У физици кондензоване материје најчешће нормирамо стања импулса на следећи начин:

$$\langle \vec{p}_1 | \vec{p}_2 \rangle = \delta^3(\vec{p}_1 - \vec{p}_2),$$

тј. узимамо

$$\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{i\vec{p}\vec{r}},$$

уз конвенцију $\hbar = 1$, јер

$$\int d\vec{r} e^{i(\vec{p}_1 - \vec{p}_2)\vec{r}} = (2\pi)^3 \delta^3(\vec{p}_1 - \vec{p}_2),$$

или

$$\langle \vec{p}_1 | \vec{p}_2 \rangle = (2\pi)^3 \delta^3(\vec{p}_1 - \vec{p}_2),$$

као у *Feynman, Statistical Mechanics*,

док

$$\langle \vec{r}_1 | \vec{r}_2 \rangle = \delta^3(\vec{r}_1 - \vec{r}_2).$$

То повлачи да је алгебра креационих и анихилационих оператора локална али ипак уграђује квантну статистику – „квантни *entanglement*“ који није локални феномен који се може описати рецимо локалним привлачним или одбојним интеракцијама.

(B) Оператори у другој квантизацији

Разматраћемо једночестичне и двојчестичне операторе. Описаћемо како применом записа „друге квантизације“ можемо избећи гломазне записе и рад са једночестичним ($\sim \sum_{i=1}^N H_i$) и двојчестичним ($\sim \sum_{i \neq j}^N H_{ij}$) операторима у „првој квантизацији“.

(a) Једночестични оператори

У различивој слици деловање једночестичног оператора A можемо описати:

$$A(|\Psi_1\rangle_1 \times |\Psi_2\rangle_2 \times \cdots \times |\Psi_N\rangle_N) = (A|\Psi_1\rangle_1) \times |\Psi_2\rangle_2 \times \cdots \times |\Psi_N\rangle_N + |\Psi_1\rangle_1 \times (A|\Psi_2\rangle_2) \times \cdots \times |\Psi_N\rangle_N + \cdots.$$

Разматрајмо један једноставан такав оператор дефинисан у *Bra-Ket* нотацији као $\delta A = |\alpha\rangle\langle\beta|$ и делујмо на произвољно $|\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_N\rangle$ (перманенту или детерминанту):

$$\delta A |\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_N\rangle = \sum_{i=1}^N \langle\beta|\Psi_i\rangle |\Psi_1, \dots, \Psi_{i-1}, \alpha, \Psi_{i+1}, \dots, \Psi_N\rangle.$$

(У горњој једначини употребили смо $\langle \ \rangle_i = \langle \ \rangle$.)

На другој страни, користећи дефиниције и креационог и анихилационог оператора:

$$\begin{aligned} a_\alpha^\dagger a_\beta |\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_N\rangle &= a_\alpha^\dagger \sum_{i=1}^N (\zeta)^{i-1} \langle\beta|\Psi_i\rangle |\Psi_1, \dots, no \Psi_i, \dots, \Psi_N\rangle \\ &= \delta A |\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_N\rangle. \end{aligned}$$

Дакле $\delta A = |\alpha\rangle\langle\beta|$ делује као $a_\alpha^\dagger a_\beta$. И у општем случају,

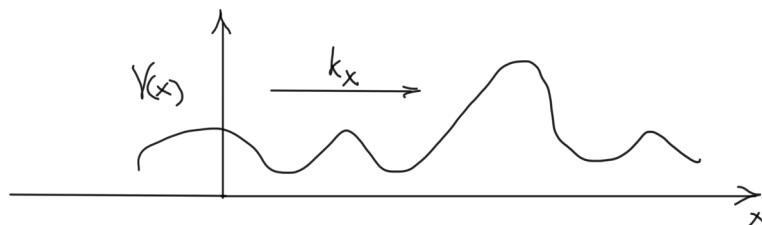
$$A = \sum_{\alpha, \beta} |\alpha\rangle \langle \alpha| A |\beta\rangle \langle \beta| \implies \sum_{\alpha, \beta} a_\alpha^\dagger \langle \alpha| A |\beta\rangle a_\beta,$$

тј. као да *Bra, Ket* (вектори стања, таласне функције) прелазе у операторе и зато назив „друга квантизација“ иако праве („друге“) квантизације нема. Права квантизација придружује физичким величинама операторе. Права

квантизација (*a la* таласних функција) се дешава када описујемо физичка поља (нпр. електромагнетно или опис на начин континуума неког система) и прелазимо из класичног или полукласичног описа у квантни опис, квантизацијом поља.

Примери једночестичних оператора:

- (i) $A = I \quad \Rightarrow \quad \hat{N} = \sum_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha}$ - оператор броја честица
(за базис $\{|\vec{r}\rangle\}$, $a_{\vec{r}}^{\dagger} a_{\vec{r}}$ представља густину у тачки \vec{r})
- (ii) $A = \hat{p}$ (импулс честице) $\Rightarrow \hat{P} = \sum_{\vec{p}} \vec{p} a_{\vec{p}}^{\dagger} a_{\vec{p}}$ - оператор импулса система
- (iii) $A = \widehat{V}(\vec{r})$ једночестични потенцијал $\Rightarrow \int d\vec{r} V(\vec{r}) \Psi^{\dagger}(\vec{r}) \Psi(\vec{r})$
Користимо уобичајену нотацију $a_{\vec{r}} \equiv \Psi(\vec{r})$. У првој квантизацији овом оператору би одговарао $\sum_{i=1}^N V(\vec{r}_i)$.
Шта се дешава са честицом импулса \vec{k} у таквом потенцијалу?



1.10

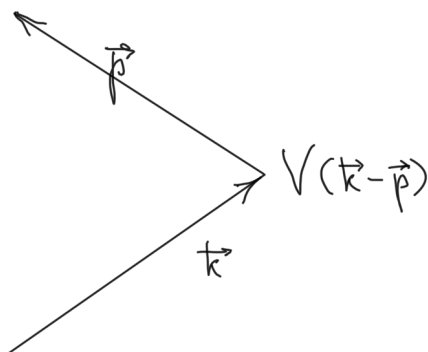
Разматрајући опис у другој квантизацији једночестичног оператора у различитим базисима нпр. $\{|\vec{r}\rangle\}$ и $\{|\vec{p}\rangle\}$ није тешко закључити како се мења опис преласком из једног у други базис. Следећи правила друге квантизација налазимо

$$|\vec{r}\rangle = \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^3} |\vec{p}\rangle e^{-i\vec{r}\vec{p}} \quad \Rightarrow \quad \Psi^{\dagger}(\vec{r}) = \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^3} e^{-i\vec{r}\vec{p}} a_{\vec{p}}^{\dagger},$$

када користимо нормализацију $\langle \vec{p}_1 | \vec{p}_2 \rangle = (2\pi)^3 \delta^3(\vec{p}_1 - \vec{p}_2)$. (Можемо у *Ket*, *Bra* репрезентацији да пређемо у нови базис и онда користимо другу квантизацију или у другој квантизацији да мењамо базис.) Дакле

$$\int d\vec{r} V(\vec{r}) \Psi^{\dagger}(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) = \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \tilde{V}(\vec{k} - \vec{p}) a_{\vec{p}}^{\dagger} a_{\vec{k}},$$

где $\tilde{V}(\vec{k} - \vec{p}) = \int d\vec{r} e^{-i\vec{r}(\vec{p} - \vec{k})} V(\vec{r})$. Честица са импулсом \vec{k} промени импулс у \vec{p} са амплитудом $\tilde{V}(\vec{k} - \vec{p})$:



1.11

Ако је $V(\vec{r}) = \text{Const}$ једночестични оператор представља хемијски потенцијал или део који улази у вредност хемијског потенцијала.

(б) Двочестични оператори

Размотримо уобичајени (дијагоналан) облик интеракције у координатној репрезентацији:

$$\hat{V} |\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n \rangle = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(\vec{r}_i, \vec{r}_j) |\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n \rangle,$$

у случају са n честица. У бозонском случају може бити $\vec{r}_k = \vec{r}_l = \dots$ итд.

У другој квантизацији овај оператор постаје

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \int d\vec{x} \int d\vec{y} \Psi^\dagger(\vec{x}) \Psi^\dagger(\vec{y}) V(\vec{x}, \vec{y}) \Psi(\vec{y}) \Psi(\vec{x}).$$

Важно је да уочимо распоред $\Psi^\dagger \Psi^\dagger \Psi \Psi$ („нормално уређење“) јер

$\Psi^\dagger \Psi \Psi^\dagger \Psi$ (као „природни“ распоред на начин густина – густина) има једночестични удео: $\langle 0 | \Psi(\Psi^\dagger \Psi \Psi^\dagger \Psi) \Psi^\dagger | 0 \rangle \neq 0$.

Доказ:

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{y}) \Psi(\vec{x}) |\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n \rangle &= \Psi(\vec{y}) \sum_{i=1}^n \zeta^{i-1} \delta^3(\vec{x} - \vec{x}_i) |\vec{x}_1, \dots, \text{no } \vec{x}_i, \dots, \vec{x}_n \rangle = \\ &= \sum_{i=1}^n \zeta^{i-1} \delta^3(\vec{x} - \vec{x}_i) \sum_{j=1, i \neq j}^n \zeta^{j-1} \delta^3(\vec{y} - \vec{x}_j) \eta^{ji} \underbrace{|\vec{x}_1, \dots, \text{no } \vec{x}_{(i)}, \dots, \text{no } \vec{x}_{(j)}, \dots, \vec{x}_n \rangle}_{\text{редослед (i) и (j) зависи од вредности i и j,} \\ &\quad \text{min(i, j), \dots, max(i, j)}} \end{aligned}$$

$$\text{где } \eta^{ji} = \begin{cases} 1 & j < i \\ -1 & j > i \end{cases}$$

$$\Psi^\dagger(\vec{x}) \Psi^\dagger(\vec{y}) \Psi(\vec{y}) \Psi(\vec{x}) |\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n \rangle =$$

$$\sum_{i=1}^n \zeta^{i-1} \delta^3(\vec{x} - \vec{x}_i) \sum_{j=1, i \neq j}^n \zeta^{j-1} \delta^3(\vec{y} - \vec{x}_j) \eta^{ji} |\vec{x}_i, \vec{x}_j, \vec{x}_1, \dots, \text{no } \vec{x}_{(i)}, \dots, \text{no } \vec{x}_{(j)}, \dots, \vec{x}_n \rangle.$$

Разматрајући $j < i$ и $j > i$ и интегралећи по \vec{x} и \vec{y} долазимо до израза у првој квантизацији.

Важан случај је случај транслаторно инваријантне интеракције $V(\vec{x} - \vec{y})$ (која се не мења кад $\vec{x} \rightarrow \vec{x} + \vec{a}$ и $\vec{y} \rightarrow \vec{y} + \vec{a}$),

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \int d\vec{x} \int d\vec{y} \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\vec{k}'}{(2\pi)^3} \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\vec{p}'}{(2\pi)^3} e^{-i\vec{x}\vec{k}} e^{-i\vec{y}\vec{k}'} V(\vec{x} - \vec{y}) e^{i\vec{x}\vec{p}} e^{i\vec{y}\vec{p}'} a^\dagger(\vec{k}) a^\dagger(\vec{k}') a(\vec{p}') a(\vec{p}).$$

У бесконачном ($V(\text{запремина}) \rightarrow \infty$) систему можемо слободно да мењамо променљиве без брига о границама:

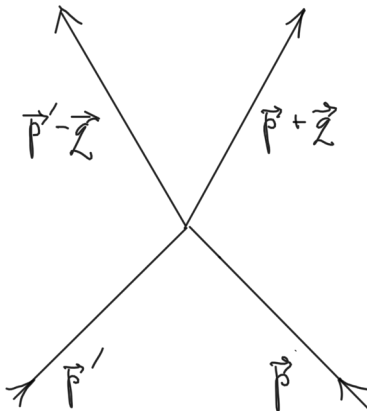
$$\vec{x} = \vec{y} + \vec{r}.$$

Интеграцијом по \vec{y} добијамо делта функцију:

$$= \frac{1}{2} \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\vec{k}'}{(2\pi)^3} \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\vec{p}'}{(2\pi)^3} (2\pi)^3 \delta^3(\vec{p} + \vec{p}' - \vec{k} - \vec{k}') \int d\vec{r} e^{-i\vec{r}(\vec{p} - \vec{k})} V(\vec{r}) a^\dagger(\vec{k}) a^\dagger(\vec{k}') a(\vec{p}') a(\vec{p})$$

$$= \frac{1}{2} \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\vec{p}'}{(2\pi)^3} \underbrace{\int d\vec{r} e^{-i\vec{r}\vec{q}} V(\vec{r})}_{\bar{V}(\vec{q})} a^\dagger(\vec{p} + \vec{q}) a^\dagger(\vec{p}' - \vec{q}) a(\vec{p}') a(\vec{p}).$$

Елементаран процес који описују оператори анихилације и креације је:



Тоталан импулс задржава исту вредност $\vec{p} + \vec{p}'$! Тотални импулс тј. импулс центра масе две честице се одржава: исти резултат би добили преласком на координате центра масе и релативне координате и одговарајуће импулсе.

Сличним поступком као у случају једночестичног оператора може се показати да двочестични оператор у репрезентацији друге квантизације у општем случају за базис $\{|\alpha\rangle\}$ је дат као

$$A_2 = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger \langle \alpha \beta | A_2 | \delta \gamma \rangle a_\gamma a_\delta,$$

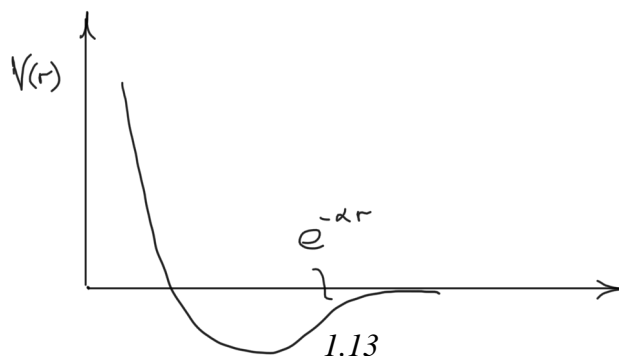
где је матрични елемент

$$\langle \alpha \beta | A_2 | \delta \gamma \rangle = (\langle \alpha |_1 \times \langle \beta |_2) A_2 (|\delta\rangle_1 \times |\gamma\rangle_2),$$

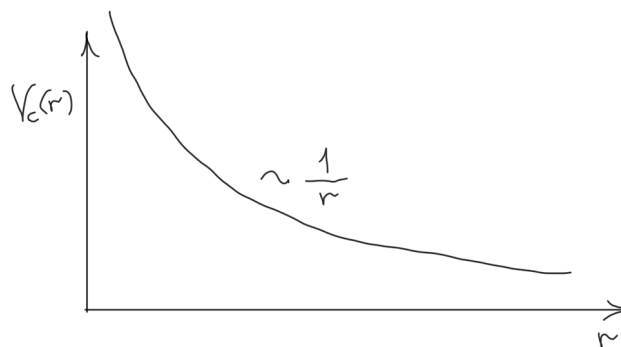
тј. подразумевамо $\langle \alpha \beta | = |\alpha \beta\rangle^\dagger$, и вектори $|\alpha \beta\rangle$ и $|\delta \gamma\rangle$ су вектори двочестичног стања у различивом запису.

Интеракција која у првој квантизацији гласи $\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$ у базису $\{|\vec{r}\rangle\}$ представља дијагонални случај $\alpha = \delta$ и $\beta = \gamma$, у запису друге квантизације, тј. $\hat{V} = \frac{1}{2} \int d\vec{x} \int d\vec{y} \Psi^\dagger(\vec{x}) \Psi^\dagger(\vec{y}) V(\vec{x}, \vec{y}) \Psi(\vec{y}) \Psi(\vec{x})$.

Уобичајене интеракције, $V(|\vec{x} - \vec{y}|)$, могу бити „краткодометне“, као ефективне интеракције међу атомима:



где електронски „облаци“ (орбитале) се одбијају на краћим растојањима, а поларизују се и привлаче на дужим, и „дугодометне“, као Кулонова интеракција међу електронима у металу,



1.14

У инверзном простору, за уобичајену Кулонову интеракцију (потенцијал) у три просторне димензије, имамо понашање, $V(|\vec{q}|) \sim \frac{1}{|\vec{q}|^2}$, што сигнализира проблем система честица на $|\vec{q}| \rightarrow 0$, тј. на великим растојањима. Систем је нестабилан и један начин да га стабилизујемо је да уведемо униформну позадину позитивног наелектрисања (ако су честице електрони).

Описали смо формализам друге квантизације. Друга квантизација је „језик многочестичних система“ – користимо је да опишемо многочестичне системе, иако и други прилази се користе, који укључују прилаз преко таласних функција (прва квантизација) и функционални прилаз преко *Feynman path* интеграла. Друга квантизација је основа за многочестични (временски зависан) пертурбациони развој, који је незаобилазан прилаз у опису одзива система на (спољашне) пробе. Многочестични (временски зависан) пертурбациони развој се користи временски зависним сликама (Хајзенбергова, интеракциона) у којима оператори попримају временску зависност слично ситуацији у квантној теорији поља (и опису релативистичких система) када разматрамо пертурбациони развој. Нпр. оператор поља,

$$\hat{\Psi}(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{x}} \hat{a}_{\vec{k}},$$

у Хајзенберговој слици неинтерагујућег система са $\hat{H}_0 = \sum_{\vec{k}} \omega_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}}$, постаје

$$\hat{\Psi}(\vec{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{x} - i\omega_{\vec{k}}t} \hat{a}_{\vec{k}}.$$

Показује се да корелатори интерагујућег система у Хајзенберговој слици се могу описати на начин пертурбационог развоја (око неинтерагујућег система користећи корелаторе неинтерагујућег система) и тако можемо описати особине (одзив) система: компресибилност, магнетну сусцептибилност, проводност, Холову проводност итд.

Експлицитно укључивање времена у опис нерелативистичких система је важно јер омогућава ефикасан опис временски зависних процеса у систему: екранирање у Кулоновим системима, електрон-фононске интеракције (са спором (јони) и брзом (електрони) динамиком система) итд., и опис одзива на пробе које се врше у времену.

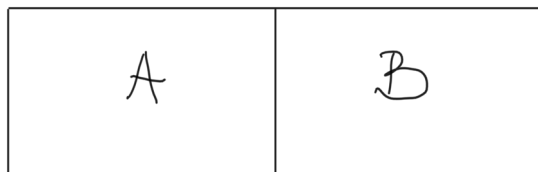
У нашем опису интерагујућих система ослонићемо се на класичне прилазе средњег поља и (временски независног) пертурбационог развоја.

2. Статистички оператор

(A) Матрица густине

Да би дефинисали статистички оператор, математички објекат који карактерише квантни систем у стању термодинамичке равнотеже, прво ћемо дефинисати матрицу густине као општији начин да се карактерише квантни систем. Увешћемо појмове *entanglement* и *entanglement* ентропију - важне појмове у теорији квантне информације. Модерна истраживања их користе да би описали квантне системе и који нису у термодинамичкој равнотежи.

Шта је то квантни *entanglement* (увезивање, уплитање)? Можемо га увести са негативним одређењем: Ако имамо два подсистема A и B једног система,



2.1

стања система без *entanglement*-а можемо описати директним производом:

$$|\alpha\rangle_A \times |\beta\rangle_B,$$

A и B могу бити различитих величина и подела може бити у реалном, импулсном простору, на скупове честица итд.

Једноставан пример стања са *entanglement*-ом је

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|\alpha\rangle_A \times |\beta\rangle_B - |\beta\rangle_A \times |\alpha\rangle_B).$$

Можемо се упитати да ли следеће стање има *entanglement*,

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|\alpha\rangle_A \times |\gamma\rangle_B + |\alpha\rangle_A \times |\beta\rangle_B).$$

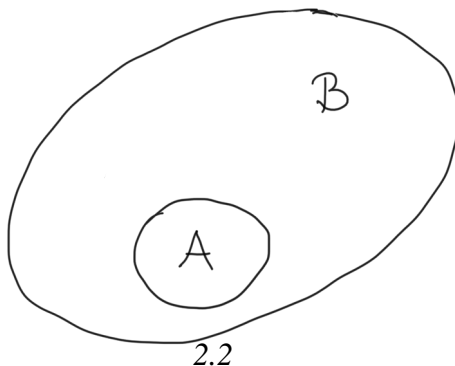
То стање се може довести у форму,

$$|\alpha\rangle_A \times \frac{1}{\sqrt{2}} (|\gamma\rangle_B + |\beta\rangle_B).$$

Дакле стање је без *entanglement*-а. Можемо закључити да нека стања прикладним избором базиса (унитарним трансформацијама) у подсистемима A и B можемо свести на једноставан производ два стања.

Да ли постоји карактеризација (стања) система која је независна од избора базиса? Како тачно описати и препознати *entanglement* разматрањем подсистема A (B) ?

Општу ситуацију мерења у КМ можемо представити на начин да је B (велика) околина подсистема A .



За мерење на једном систему увек постоји околина и опис A преко могућих стања треба уопштити на опис на начин матрице густине $\hat{\rho}_A$ – оператора који уводимо на следећи начин:

- (i) Претпоставимо да је цео систем $A + B$ у нормираном стању $|\Psi\rangle \equiv |\Psi\rangle\rangle$, $\langle\langle\Psi|\Psi\rangle\rangle = 1$, и
- (ii) $\{|\alpha\rangle\}$ и $\{|\beta\rangle\}$ су базиси у A и B .

$$\begin{aligned} \langle\langle\Psi|\hat{A} \otimes \hat{I}|\Psi\rangle\rangle &= \sum_{A,A',B} \langle\langle\Psi|(|A\rangle \times |B\rangle)\langle A|\hat{A}|A'\rangle\langle B| \times \langle A'|)|\Psi\rangle\rangle \\ &= \sum_{A,A'} \langle A|\hat{A}|A'\rangle \sum_B (\langle B| \times \langle A'|)|\Psi\rangle\rangle \langle\langle\Psi|(|A\rangle \times |B\rangle) \\ &= \text{tr}_A(\hat{A}\hat{\rho}_A), \end{aligned}$$

где $\hat{\rho}_A = \text{tr}_B(|\Psi\rangle\langle\Psi|)$ представља матрицу густине као парцијалног трага по подсистему B .

Пример 1. A и B подсистеми са спином $s = \frac{1}{2}$:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_A \times |\downarrow\rangle_B - |\downarrow\rangle_A \times |\uparrow\rangle_B)$$

$$\Rightarrow \hat{\rho}_A = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Са $\hat{\rho}_A$ није описана класична расподела: 50% $|\uparrow\rangle$ и 50% $|\downarrow\rangle$ („писмо, глава“), већ такође 50% $|+\rangle = \frac{(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)}{\sqrt{2}}$ и 50% $|-\rangle = \frac{(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle)}{\sqrt{2}}$, чак $\hat{\rho}_A = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{4\pi} \int d\vec{\Omega} |\vec{\Omega}\rangle\langle\vec{\Omega}|$ (могућа су сва стања Блохове сфере).

На тај начин описујемо инхерентну недоступност квантне информације са новим нивом неодређености – уместо стања користимо операторе (матрице).

Пример 2. $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_A + |\downarrow\rangle_A) \times |\uparrow\rangle_B \Rightarrow \hat{\rho}_A = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$

$$\Rightarrow \hat{\rho}_A^2 = \hat{\rho}_A$$

За тзв. „чисто стање“ (као супротност „мешаном“) може се наћи базис у коме $\hat{\rho}_A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$.

Особине матрице густине:

$$(i) \quad |\Psi\rangle = \sum_{A,B} C_A^B |A\rangle_A \times |B\rangle_B$$

$$\langle A' | \hat{\rho}_A | A'' \rangle = \sum_B C_{A'}^B (C_{A''}^B)^* = \langle A'' | \hat{\rho}_A | A' \rangle^*$$

$$\Rightarrow \hat{\rho}_A \quad \text{је хермитски оператор.}$$

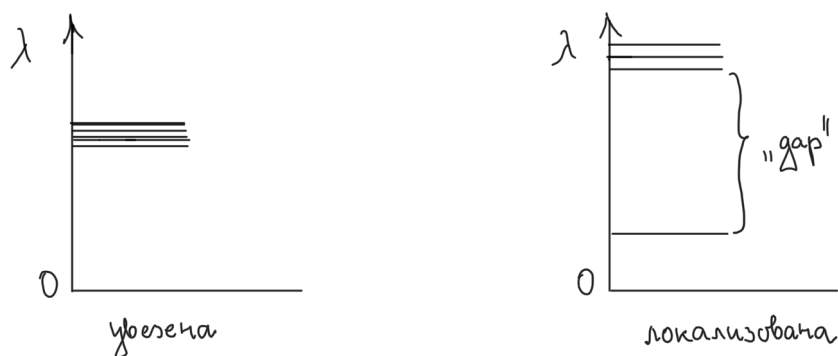
(ii)

$$1 = \langle\langle\Psi|\Psi\rangle\rangle = \text{tr}_A \hat{\rho}_A (= \sum_{A,B} |C_A^B|^2) = \sum_{\tilde{\lambda}} e^{-\lambda_{\tilde{\lambda}}}$$

$\Rightarrow \hat{\rho}_A$ има јединични траг и позитивне својствене вредности које могу бити и нуле (*positive semi-definite*).

Скуп вредности, $\{\lambda_{\tilde{\lambda}}\}$ = “*entanglement spectrum*”,

описује колико је увезана или локализована информација:

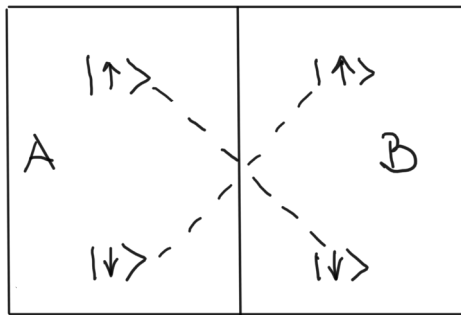


2.3

Стање,

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle_A \times |\downarrow\rangle_B - |\downarrow\rangle_A \times |\uparrow\rangle_B),$$

је пример када постоји максимална увезаност:



2.4

Која величина описује степен недоступности информације

мешаног стања тј. степен *entanglement*-а? →

Entanglement ентропија: $S = -tr(\hat{\rho} \ln \hat{\rho})$

као мера увезаности стања:

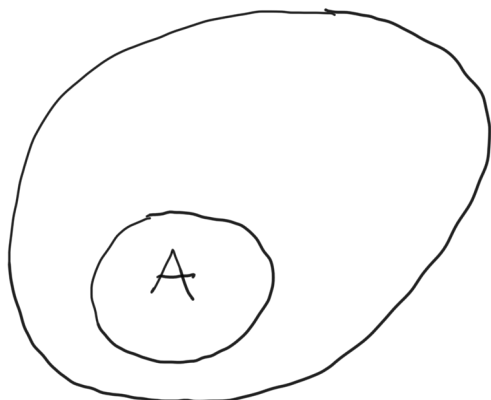
$$\hat{\rho} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \Rightarrow S = 0$$

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \Rightarrow S = \ln 2 ; \text{ где } 2 \text{ представља број увезаних стања}$$

= димензија простора \Rightarrow максимална увезаност!

$$\hat{\rho} = \begin{bmatrix} \frac{1}{n} & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \frac{1}{n} \end{bmatrix}_{n \times n} \Rightarrow S = \ln n$$

(Б) Статистички оператор



$$A : V, N, T$$

Класичан систем A , запремине V и броја честица N , у стању термодинамичке равнотеже на температури T можемо описати Гибсовом, канонском расподелом ρ_A :

$$\rho_A \sim e^{-\beta E(p,q)}$$

$$\{p, q\} = \{q_1, \dots, q_{3N}, p_1, \dots, p_{3N}\}.$$

Такву расподелу можемо очекивати када претпоставимо постојање стационарне расподеле ($\frac{\partial \rho_A}{\partial t} = 0$), еволуцију (под)система A као затвореног за известан (коначан) интервал времена (Δt) што води једном диференцијалном опису на начин *Liouville* теореме ($\frac{d\rho_A}{dt} = 0$), и уз претпоставку статистичке независности ($\rho_{A_1+A_2} = \rho_{A_1} \cdot \rho_{A_2}$).

Ако разматрамо A на начин КМ можемо увести матрицу густине $\hat{\rho}_A = \sum_i w_i |i\rangle\langle i|$ у времену t_0 . Ако претпоставимо (насупротив КМ очекивању, постојању *entanglement*-а итд.) да је A изолован за време Δt и $\hat{H} \equiv \hat{H}_A$ следи да унутар тог интервала $\hat{\rho}_A(t) = e^{-i\hat{H}t} \hat{\rho}_A(t_0) e^{i\hat{H}t}$ тј. уопште важи:

$$i \frac{\partial \hat{\rho}_A}{\partial t} = [\hat{H}, \hat{\rho}_A],$$

Liouville – von Neumann једначина. За стационарно $\hat{\rho}_A$, уз претпоставку статистичке независности можемо увести решење тзв. статистички оператор:

$$\hat{\rho}_A = \frac{e^{-\beta \hat{H}}}{\text{tr } e^{-\beta \hat{H}}}.$$

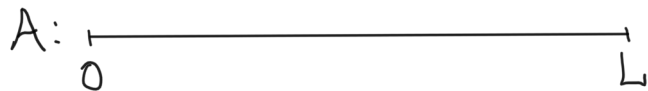
Применили смо идеје класичне статистичке механике. Да ли смо сувише занемарили КМ (претпостављајући да за коначно Δt , A је изоловано)? Шта смо заиста „занемарили“?

Пример: $N = 1, V \rightarrow L$ (честица у једној димензији)

$$\langle x | k_n \rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik_n x}$$

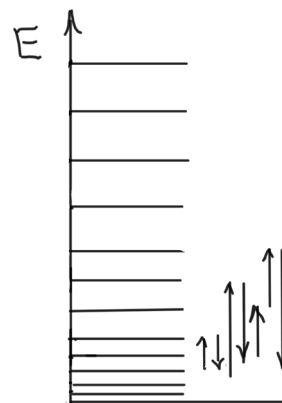
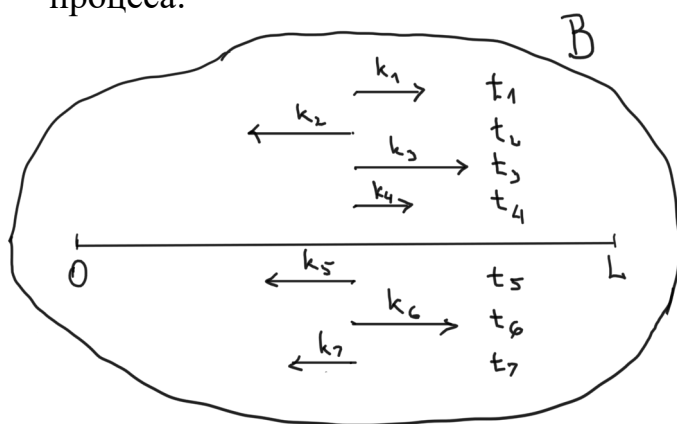
$$k_n = n \frac{2\pi}{L}; n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

$$\langle k_n | \hat{H} | k_m \rangle = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} \delta_{m,n} = E_n \delta_{m,n}$$



2.6

Макроскопски систем B који „термализује“ A преко судара = случајних процеса:



2.7

Матрица густине $\rho_A(t) \equiv \rho(t)$:

$$\rho(t) = \begin{bmatrix} \ddots & \dots & \ddots \\ \vdots & \rho_{mn}(t) & \vdots \\ \ddots & \dots & \ddots \end{bmatrix}$$

Недијагонални елементи у $\rho(t)$ описују прелазак са једног нивоа (n) на други (m) тј. нетривијални *entanglement* у коме се „квантна кохеренција“ не може одржати.

Претпостављамо да за одређено карактеристично време τ КМ система усредњавање недијагоналних – комплексних елемената даје нулу = претпоставка случајних фаза:

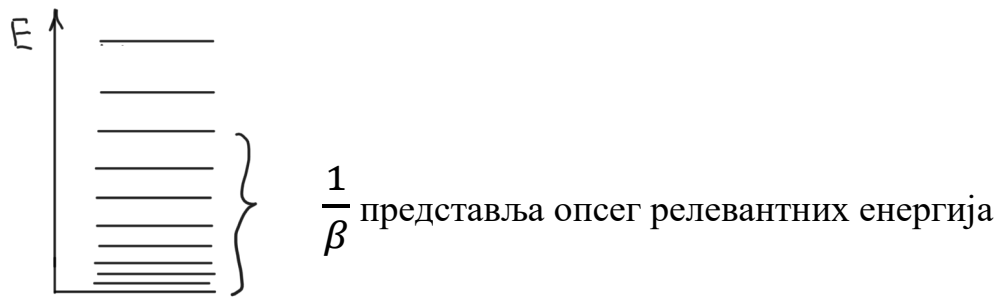
$$\frac{1}{\tau} \int_{t_0}^{t_0+\tau} dt \rho_{mn}(t) = \rho_{mn}(t_0, \tau) \delta_{m,n}.$$

Експериментална мерења треба да се врше у интервалу $\tau_m > \tau$ да би била у складу са очекивањима на бази статистичког оператора. Сам статистички оператор који описује систем уводи додатну претпоставку термализације тј. случајни сударни процеси омогућавају статистички прилаз на начин уобичајене канонске расподеле:

$$\rho_{mn} = \frac{e^{-\beta E_n}}{\sum_n e^{-\beta E_n}} \delta_{m,n}.$$

Очекујемо да $\lim_{T \rightarrow \infty} \tau(T) = 0$ тј. многобројни судари онемогућавају еволуцију на начин КМ (опис је све тачнији што је температура виша), а на ниским температурама потребна је претпоставка и случајних фаза и термализације да би мерена величина била дата преко статистичког оператора.

$\hat{\rho}_A = \frac{e^{-\beta \hat{H}}}{\text{tr } e^{-\beta \hat{H}}}$ представља мешано стање са параметром мешања β .



2.8

$$\begin{aligned} \text{tr } e^{-\beta \hat{H}} &= \sum_n e^{-\beta E_n} = \sum_k \left(\frac{\Delta k}{2\pi/L} \right) e^{-\beta E_k} \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \\ &\rightarrow \frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{-\beta E_k} = \frac{L}{2\pi} \sqrt{\frac{2m}{\beta \hbar^2}} \sqrt{\pi} = \frac{L}{\lambda_T} \end{aligned}$$

$$\rho_{mn} = \frac{\lambda_T}{L} e^{-\beta E_k} \delta_{m,n}$$

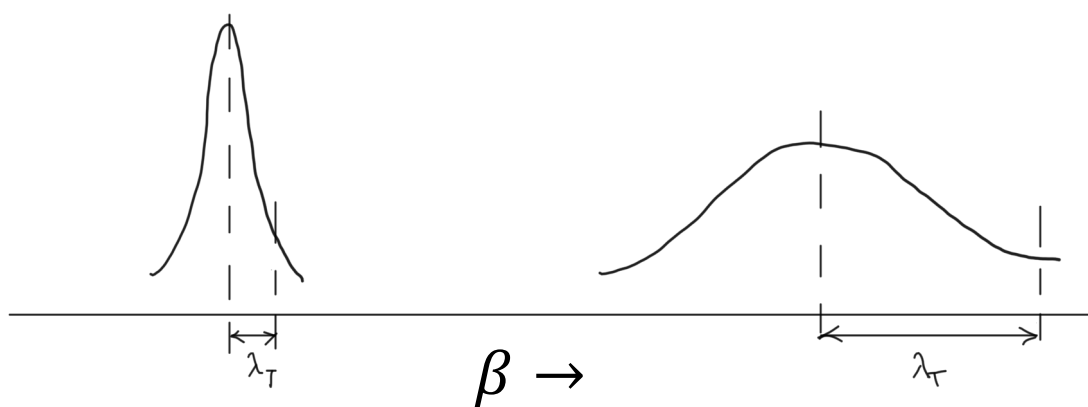
Средња енергија честице је $\bar{E} = \frac{1}{2} k_B T$ као и у класичним разматрањима.

Да ли смо „изгубили“ КМ? Шта добијамо за следећу корелацију?

$$\langle x | \hat{\rho} | x' \rangle = \frac{\langle x | e^{-\beta \hat{H}} | x' \rangle}{\int dx \langle x | \hat{\rho} | x \rangle}$$

$\hat{\rho}$ носи информацију о систему и „пројектује“ $|x'\rangle$ у систем и даје преклапање, амплитуду (\sim вероватноћу) преласка у $|x\rangle$. Поново разматрајући лимес великог система у базису импулса добијамо

$$\langle x | \hat{\rho} | x' \rangle = \frac{1}{L} e^{-\pi \frac{(x-x')^2}{\lambda_T^2}}.$$



2.9

Како је распон релевантних енергија ограничен $\epsilon \lesssim \frac{1}{\beta}$ следи да $\sqrt{\langle p^2 \rangle} \sim \frac{1}{\lambda_T}$.

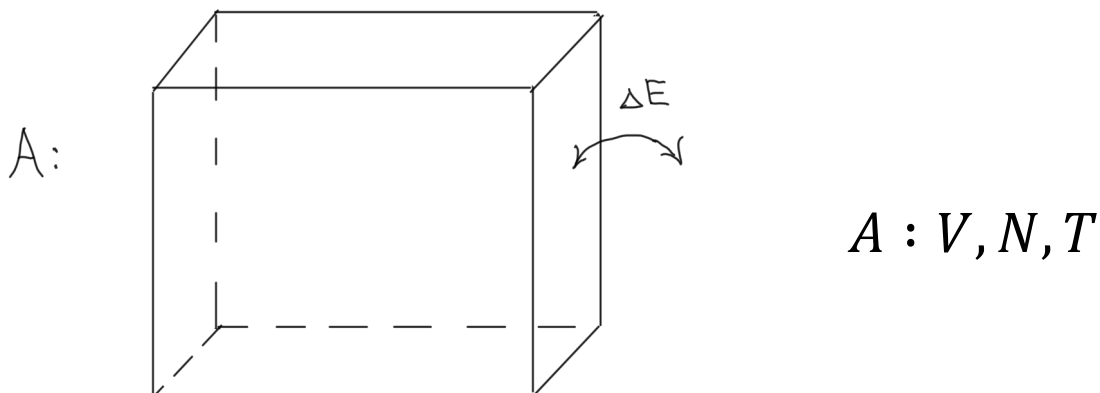
То је уједно и опис „максимума неодређености“ импулса честице и тиме и опис „минимума неодређености“ координате честице, $\Delta x \sim \lambda_T$.

Учестали судари на вишим температурама размазују вредност p (стварају неодређеност у p) и то смањује неодређеност x (која је бесконачна у $T = 0$ када је $|p = 0\rangle$ „чисто“ стање система).

3. Идеални Бозе и Ферми гасови

(А) Увод

Разматрамо систем честица у „кутији“ са периодичним граничним условима јер на лак начин уграђујемо квантовање и неодређеност импулса у коначној запремини.



3.1

Вероватноћа стања i са енергијом E_i :

$$w_i = \frac{e^{-\beta E_i}}{\sum_i e^{-\beta E_i}}$$

То су уједно својствене вредности статистичког оператора у базису („унутрашњег“) Хамилтонијана $\hat{H} \equiv \hat{H}_A$. И очекивана вредност оператора – физичке величине \hat{O} је дата преко трага: $tr(\hat{\rho}\hat{O}) = \sum_i w_i \langle i|\hat{O}|i\rangle$.

Дефинишимо партициону суму као: $Q = \sum_i e^{-\beta E_i}$. На који начин се везујемо са термодинамиком?

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln Q \quad (\text{Хелмхолцова}) \text{ слободна енергија}$$

И заиста ако изразимо: E (унутрашња енергија) = $\sum_i w_i E_i$

$$S(\text{ентропија}) = -k_B \sum_i w_i \ln w_i$$

можемо увидети да $F = E - T S$.

Квантни идеални гасови:

Такви гасови морају да интерагују са околином да би били у стању термодинамичке равнотеже али честице самог гаса не интерагују.

Идеализација одсуства интеракције је ипак корисна када желимо да упознамо реалне системе.

Хамилтонијан система је облика

$$\hat{H} = \sum_a \epsilon_a \hat{n}_a,$$

где a представља једночестично стање чију попуњеност - број честица у стању обележавамо са n_a .

Класификација својствених стања је дата преко попуњености стања:

$$|n_1, \dots, n_a, \dots\rangle.$$

Ако желимо да израчунамо Q у случају идеалних гасова проблем представља захтев да радимо са фиксираним бројем честица $\sum_a n_a = N$. Због тога разматрамо систем у термодинамичкој равнотежи са околином са којом размењује енергију и честице!

$$w_i \rightarrow w_{i(N)} = \frac{e^{-\beta(E_i^N - \mu N)}}{\sum_{N, i_N} e^{-\beta(E_i^N - \mu N)}}.$$

Параметар μ одређује тежину различитих N , и $(V, N, T \Rightarrow) V, \mu, T$ постају фиксирани параметри система. Параметри μ, T одређују вероватноћу стања $|N, E_i^N\rangle$.

Сада уводимо

$$Q^{(\mu)} = \sum_{N, i(N)} e^{-\beta(E_i - \mu N)},$$

и идентификујемо

$$\Omega(V, \mu, T) = -\frac{1}{\beta} \ln Q^{(\mu)},$$

са (великим) термодинамичким потенцијалом, $\Omega = F - \mu N$. Заиста, може се проверити да E (унутрашња енергија) = $\sum_{N, i(N)} w_{i(N)} E_i^N$ и да S (ентропија) = $-k_B \sum_{N, i(N)} w_{i(N)} \ln w_{i(N)}$ оправдавају овакву дефиницију (преко $Q^{(\mu)}$) термодинамичког потенцијала. Зато важи

$$-\left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}\right)_{T, V} = N,$$

и ову једначину можемо сматрати за „главну једначину“ чијим решавањем μ – хемијски потенцијал се може изразити преко уобичајених варијабли V, N, T тј. $\mu = \mu(V, N, T)$, и тиме и друге величине преко V, N, T .

Разматрајмо лимес великих температура $T \rightarrow \infty$. У том лимесу за коначно μ , $e^{+\beta\mu N} \rightarrow 1$. Ако је тако μ више не представља тежину неопходну да систем карактерише одређено $\langle N \rangle \equiv N$. Зато очекујемо да за $T \rightarrow \infty$, $\mu \rightarrow -\infty$.

(Системи који немају независно N тј. N није независна варијабла која карактерише систем као константа кретања – ситеми са фотонима, фононима, магنونима који могу да нестају и настају, имају $\mu = 0$.)

Вратимо се на идеалне системе честица за које $\hat{H} = \sum_a \epsilon_a \hat{n}_a$ и стање система (i) је задато преко попуњености једночестичних нивоа : $|n_1, \dots, n_a, \dots\rangle$ тј. скупом бројева $\{n_a\}$ и важи, $N = \sum_a n_a$ и $E_i^N = \sum_a \epsilon_a n_a$.

$$\begin{aligned}
Q^{(\mu)} &= \sum_{\substack{N, i(N) \\ \text{сума по свим могућим стањима}}} e^{-\beta(E_i - \mu N)} \\
&= \underbrace{\sum_{n_1=0}^{\bar{n}} \dots \sum_{n_a=0}^{\bar{n}} \dots}_{\text{сума по свим могућим стањима}} e^{-\beta \sum_a n_a (\epsilon_a - \mu)} = Q_1^{(\mu)} Q_2^{(\mu)} \dots
\end{aligned}$$

где $Q_a^{(\mu)} = \sum_{n_a=0}^{\bar{n}} e^{-\beta n_a (\epsilon_a - \mu)}$ и $\bar{n} = 1$ за фермионе и $\bar{n} = \infty$ за бозоне.

Разматрањем система на начин „великог канонског ансамбла“ тј. увођењем независног параметра μ долазимо до декупловања (као да су независни системи) описа на издвојена стања a . Параметар μ се одређује из услова (наметнуте везе) да је $\langle N \rangle$ фиксирано.

Можемо дефинисати: $\Omega_k = -\frac{1}{\beta} \ln Q_k^{(\mu)}$ јер често $a \equiv k$ тј. представља стање одређеног импулса. Следи

$$\langle n_k \rangle = -\frac{\partial \Omega_k}{\partial \mu} = \sum_{n=0}^{\bar{n}} n \frac{e^{-\beta n (\epsilon_k - \mu)}}{\sum_{n=0}^{\bar{n}} e^{-\beta n (\epsilon_k - \mu)}} = \sum_{n=0}^{\bar{n}} n w_n(k).$$

Разматрајмо поново $T \rightarrow \infty$. Претпоставимо да $w_0(k), w_1(k) \gg w_n(k)$ за $n > 1$, тј. занемарљива насељеност нивоа (највише 1) на високим температурама.

$$\langle n_k \rangle \approx 0 \cdot w_0(k) + 1 \cdot w_1(k) = \frac{e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)}}{e^{-\beta \Omega_k}} \approx e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)} \text{ јер } w_0(k) = \frac{1}{e^{-\beta \Omega_k}} \approx 1.$$

Дошли смо до израза за класичну – *Maxwell-Boltzman*-ову статистику. Како је

$$\langle n_k \rangle \approx w_1(k) \approx e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)} \text{ очекујемо } \mu \rightarrow -\infty.$$

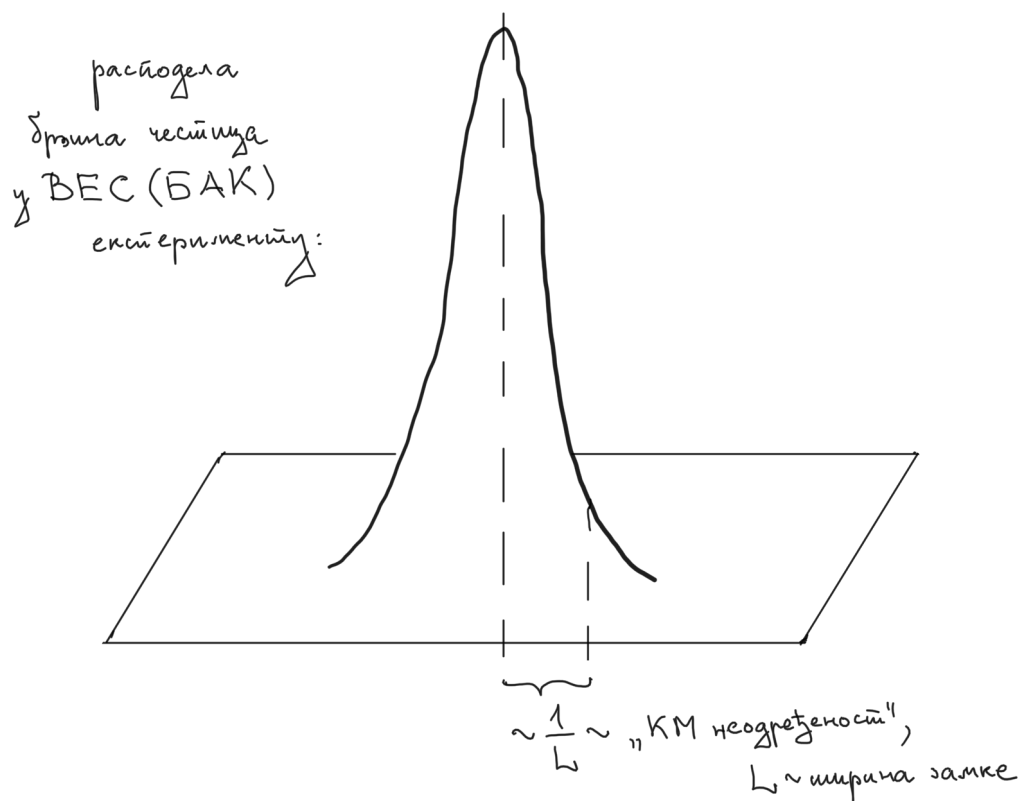
Можемо да кренемо од Максвел-Болцманове статистике: за изоловану честицу (у претходном поглављу) нашли смо $w(k) = \frac{\lambda_T^3}{V} e^{-\beta \epsilon_k}$ – тј. вероватноћу да је честица у стању са импулсом k . Класично нема корелација међу честицама и насељеност стања импулса k система са N таквих честица можемо изразити као $\langle n_k \rangle = N w(k) = \rho \lambda_T^3 e^{-\beta \epsilon_k}$ ($\rho = \frac{N}{V}$). Зато $\mu = \frac{1}{\beta} \ln(\rho \lambda_T^3) \xrightarrow{T \rightarrow \infty} -\infty$ и $\langle n_k \rangle \xrightarrow{T \rightarrow \infty} 0$.

(Б) Идеални Бозе гас

(а) Бозе-Ајнштајн кондензација (БАК)

Разматраћемо појаву Бозе-Ајнштајн кондензације у идеалном гасу. Појаву карактерише макроскопско попуњавање најнижег енергетског нивоа. То је врста уређења гаса која постоји на ниским температурама.

У сваком реалном гасу постоје интеракције па је сама појава експериментално опажена тек крајем двадесетог века. Потребан је јако слабо интерагујући – разређени гас тј. $a = \left(\frac{V}{N}\right)^{\frac{1}{3}}$ је велико, а са друге стране захтевамо да $a < \lambda_T$, да би били у квантном режиму. Неопходне су веома ниске температуре и експериментални системи честица атома се карактеришу као „хладни атоми“ (“cold atoms”).



Разматрајмо једночестични енергетски ниво ϵ_a са произвољном попуњености $n_a = 0, 1, 2, \dots$

$$Q_a^{(\mu)} = \sum_{n_a=0}^{\infty} e^{-\beta n_a(\epsilon_a - \mu)} = \frac{1}{1 - e^{-\beta(\epsilon_a - \mu)}}.$$

Ако је $\epsilon_0 = 0$ следи (да би избегли бесконачност у сумирању) да $\mu \leq 0$ (у коначном систему $\mu < 0$, али смо укључили граничну вредност и могућност, $\mu = 0$, за $N \rightarrow \infty$).

$$\Omega = -\frac{1}{\beta} \sum_p \ln \frac{1}{1 - e^{-\beta(\epsilon_p - \mu)}} \quad \text{где } \epsilon_p = \frac{p^2}{2m}.$$

$$\langle N \rangle = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} = \sum_p \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_p - \mu)} - 1} \xrightarrow{V \rightarrow \infty} \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\vec{p} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_p - \mu)} - 1} \quad \text{где } \hbar = 1.$$

Насељеност стања са енергијом ϵ_p је дата на начин Бозе-Ајнштајн расподеле.

Можемо разматрати тзв. високотемпературни развој по малом параметру $z = e^{\beta\mu}$ ($z \leq 1$).

$$\begin{aligned} \frac{\langle N \rangle}{V} &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{p} \frac{e^{-\beta(\epsilon_p - \mu)}}{1 - e^{-\beta(\epsilon_p - \mu)}} \\ &= \underbrace{\frac{z}{\lambda_T^3}}_{\text{класичан удео}} + \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{p} e^{-\beta^2 \epsilon_p z^2} + o(z^3) = \frac{1}{\lambda_T^3} \zeta_{3/2}(z) \end{aligned}$$

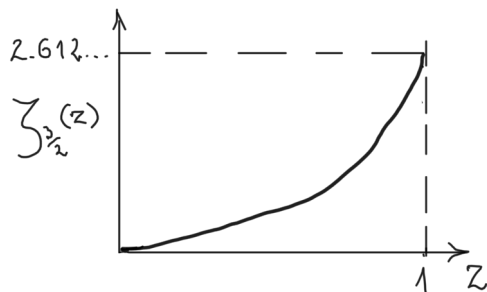
где $\zeta_{3/2}(z) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n^{3/2}}$, што можемо добити једноставним скалирањем $\beta \rightarrow n\beta$ у интегралу везаном за класични (први) допринос. $\zeta_s(z)$ је уопштење *Riemann*-ове зета функције, $\zeta_s(z=1)$.

Радимо на константној густини $\rho = \frac{N}{V} = \text{Const}$ и тражимо μ .

$$\zeta_{3/2}(z) = \rho \lambda_T^3 \sim \frac{1}{T^{3/2}}$$

Када температура опада следи да лева страна расте са растом z .

Максимално $z = 1$ ($\mu = 0$) може да се деси на коначној температури!



3.3

Дакле за $z = 1 (\mu = 0)$ на коначној температури T_c следи $\frac{1}{\rho} = a^3 = \frac{\lambda_T^3}{\zeta_{3/2}(1)} \approx$

λ_T^3 тј. квантна статистика постаје важна.

Али за $T < T_c$ из $\zeta_{3/2}(1) = \rho \lambda_T^3$ следи да за ниже температуре ρ треба да опада?! (а претпоставка је да се не мења – тако смо задали систем).

„Где су честице?“ Морају бити у кондензату тј. у стању са $\epsilon_0 = 0$. Јер то стање има изузетан допринос и такав допринос може бити невидљив при преласку на интеграцију (мера = 0):

$$N_0 = \frac{1}{e^{-\beta\mu} - 1} \xrightarrow{T \rightarrow T_c, N \rightarrow \infty} \infty$$

Можемо се запитати шта се догађа са нивоима блиске енергије – каква је њихова попуњеност? Нека ϵ_1 означава један такав ниво тј.

$\epsilon_1 \sim p^2 \sim \frac{1}{L^2} \sim \frac{1}{V^{2/3}}$ и на коначној температури:

$N_1 = \frac{1}{e^{\beta\epsilon_1} - 1} \sim V^{2/3} \Rightarrow \lim_{V, N \rightarrow \infty} \frac{N_1}{N_0} = 0$, јер оцењујемо да је неопходна макроскопска попуњеност $N_0 \sim N \sim V$ (при константном ρ) да би надокнадили изостанак удела у интеграцији.

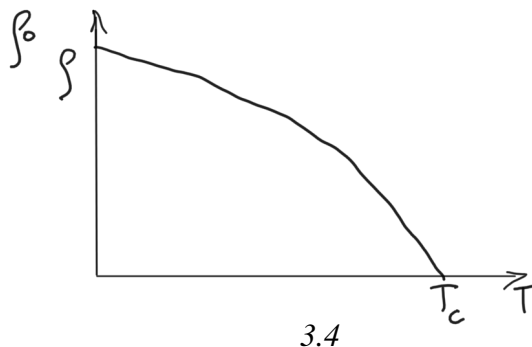
За $T < T_c$ дакле важи $N = N_0 + \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\vec{p} \frac{1}{e^{\beta\epsilon_p} - 1}$ или

$n_p = \frac{(2\pi)^3}{V} N_0 \delta^3(p) + \frac{1}{e^{\beta\epsilon_p} - 1}$, док класично нема сингуларности:

$$n_p = \frac{\lambda_T^3}{V} e^{-\beta\epsilon_p}.$$

Ако $\rho_0 = \frac{N_0}{V}$ представља густину кондензата а ρ_{exc} густину честица ван кондензата можемо закључити да, користећи $\rho = \rho_0 + \rho_{exc}$,

$$\rho_0 = \rho - \rho_{exc} = \frac{\zeta_{3/2}(1)}{\lambda_{T_c}^3} - \frac{\zeta_{3/2}(1)}{\lambda_T^3} = \frac{\zeta_{3/2}(1)}{\lambda_{T_c}^3} \left(1 - \frac{T^{3/2}}{T_c^{3/2}} \right).$$



(б) Фазни прелази идеалног Бозе гаса

При уобичајеном услову да $\rho = Const$ нашли смо зависност броја честица у кондензату од температуре. Близу T_c можемо закључити да $\rho_0 = \rho - \rho_{exc} \sim (T_c - T)$. Како се понаша унутрашња енергија, каква је зависност топлотног капацитета у близини T_c ?

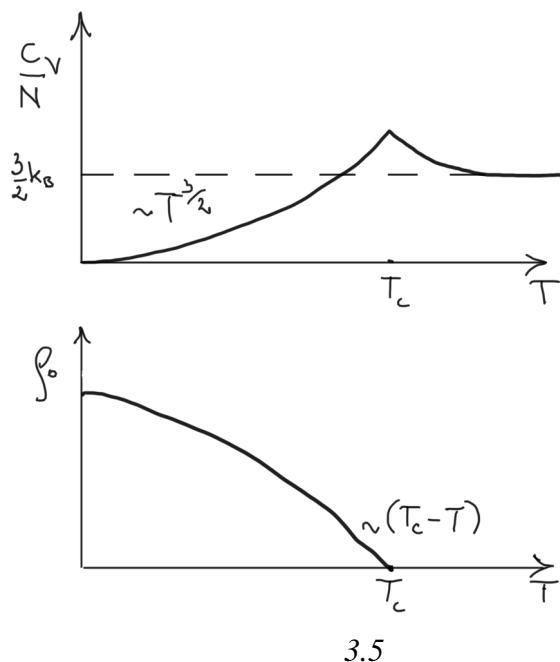
Разматрајући поново високотемпературни развој закључујемо:

$$E = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\vec{p} \epsilon_p \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_p - \mu)} - 1} = \frac{3}{2} k_B T \frac{z}{\lambda_T^3} V + \dots = \frac{3}{2} k_B T \frac{\zeta_{5/2}(z)}{\lambda_T^3} V.$$

За температуре $T > T_c$ можемо искористити претходни резултат за $N \Rightarrow E = \frac{3}{2} k_B T \frac{\zeta_{5/2}(z)}{\zeta_{3/2}(z)} N$. Дакле као што очекујемо, $E \xrightarrow{T \rightarrow \infty} \frac{3}{2} k_B T N$.

За температуре $T < T_c$ можемо искористити претходни резултат $\Rightarrow E = \frac{3}{2} k_B T \frac{\zeta_{5/2}(1)}{\lambda_T^3} V$. Дакле $E \sim T^{5/2}$ за $T < T_c$.

Како радимо при услову $\rho = Const$ тј. $V = Const$ и $N = Const$ следи да можемо да нађемо $C_V = \frac{dE}{dT}$, топлотни капацитет при константној запремини. Детаљном анализом понашања E (прво μ) за $T \gtrsim T_c$ (погледати Ландау, Лифшиц књигу) долази се до описа „шиљка“ („cusp“-а) у близини T_c .



Можемо се упитати да ли је овај прелаз, који се дешава у систему без интеракција, индукован необичном статистиком, тзв. прелаз друге врсте тј. континуалан прелаз. (То је прелаз без скока у опису, фазе полако еволуирају и на T_c се очекује да постоји прелазна - јединствена фаза.) У опису преко ρ_0 не видимо скок. Око T_c постоје значајне флуктуације - промене (да би се еволуција фазе догодила). Мера флуктуација је корелациона дужина ξ , тј. дужина дуж које флуктуације микроскопских величина су корелисане = исте. Континуалан прелаз се карактерише дивергенцијом корелационе дужине на критичној тачки тј. $\xi \rightarrow \infty$ како $T \rightarrow T_c$.

Да би нашли ξ пре свега треба да уведемо параметар уређења и разматрамо његову корелациону функцију. Из понашања $\sqrt{\rho_0} \sim \sqrt{(T_c - T)}$ близу T_c , што нам је позната зависност параметра уређења при опису фазних прелаза на начин средњег поља (Ландау опис), можемо доћи до очекивања да параметар уређења треба везивати за само (микроскопско) бозонско поље тј. оператор поља у другој квантизацији: $\Psi(\vec{r})$. Зато разматрајмо следећи корелатор:

$$\langle \Psi^\dagger(\vec{r}_1) \Psi(\vec{r}_2) \rangle_T \equiv \text{tr}(\Psi^\dagger(\vec{r}_1) \Psi(\vec{r}_2) \hat{\rho}) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} e^{-i\vec{k}_1 \vec{r}_1 + i\vec{k}_2 \vec{r}_2} \text{tr} \left(\underbrace{a_{\vec{k}_1}^\dagger a_{\vec{k}_2} \hat{\rho}}_{= \delta_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} \hat{n}_{\vec{k}_1}} \right).$$

(Вредност трага добијамо: $U = e^{i\vec{x}\vec{P}}$, $U^{-1}a_{\vec{k}_2}U = e^{i\vec{k}_2\vec{x}}a_{\vec{k}_2}$, $U^{-1}a_{\vec{k}_1}^\dagger U = e^{-i\vec{k}_1\vec{x}}a_{\vec{k}_1}^\dagger \Rightarrow \text{tr}(a_{\vec{k}_1}^\dagger a_{\vec{k}_2}\hat{\rho}) = e^{i(\vec{k}_2-\vec{k}_1)\vec{x}}\text{tr}(a_{\vec{k}_1}^\dagger a_{\vec{k}_2}\hat{\rho}) \Rightarrow$ ненулти траг само ако $\vec{k}_2 = \vec{k}_1$.)

Када $T < T_c \Rightarrow$

$$\langle \Psi^\dagger(\vec{r}_1) \Psi(\vec{r}_2) \rangle_T = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}(\vec{r}_1-\vec{r}_2)} = \frac{N_0}{V} + \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} n_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}(\vec{r}_1-\vec{r}_2)},$$

и важи $\lim_{|\vec{r}_1-\vec{r}_2| \rightarrow \infty} \langle \Psi^\dagger(\vec{r}_1) \Psi(\vec{r}_2) \rangle_T = \rho_0 + o\left(\frac{1}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|}\right)$. Ово је исказ који описује (за $\rho_0 \neq 0$) тзв. *ODLRO* (*off-diagonal long-range order*) – врсту корелација ако постоји БАК.

Када $T > T_c \Rightarrow$

$$\langle \Psi^\dagger(\vec{r}_1) \Psi(\vec{r}_2) \rangle_T = \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{e^{-i\vec{k}(\vec{r}_1-\vec{r}_2)}}{\frac{1}{z}e^{\beta\epsilon_k} - 1}.$$

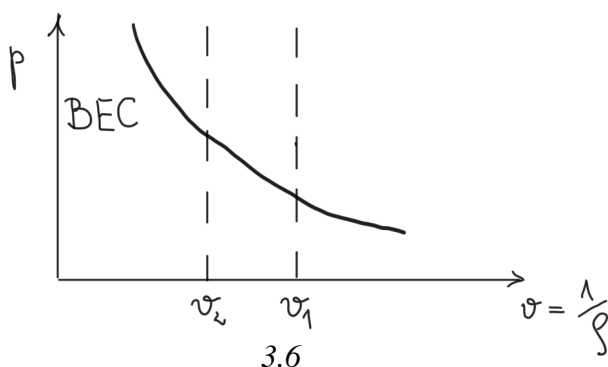
Разматраћемо корелације за $T \rightarrow T_c$ тј. $z \rightarrow 1$. Такође да би оценили корелације на великим растојањима применићемо дуготаласну апроксимацију: сматраћемо да највећи допринос интегралу долази од $|\vec{k}| \approx 0$ када $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \rightarrow \infty$. За веће $|\vec{k}|$ процењујемо да честе осцилације експоненцијалног фактора за $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \rightarrow \infty$, знатно смањују допринос интегралу у том лимесу. Зато $\frac{1}{z}e^{\beta\epsilon_k} - 1 \approx \frac{\beta}{2m}(|\vec{k}|^2 + k_c^2)$ где $k_c^2 \sim \frac{1-z}{\lambda_T^2}$. На тај начин подинтегрална функција је облика *Yukawa* потенцијала у инверзном простору. Зато очекујемо, када $T \rightarrow T_c$, корелације следећег облика:

$$\lim_{|\vec{r}_1-\vec{r}_2| \rightarrow \infty} \langle \Psi^\dagger(\vec{r}_1) \Psi(\vec{r}_2) \rangle_T \sim \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} e^{-\frac{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|}{\xi}},$$

где корелациона дужина, $\xi \sim \frac{\lambda_T}{1-z} \xrightarrow{T \rightarrow T_c} \infty$. Постојање дивергенције сугерише да прелаз у фазу са кондензатом, снижавањем температуре при $\rho =$

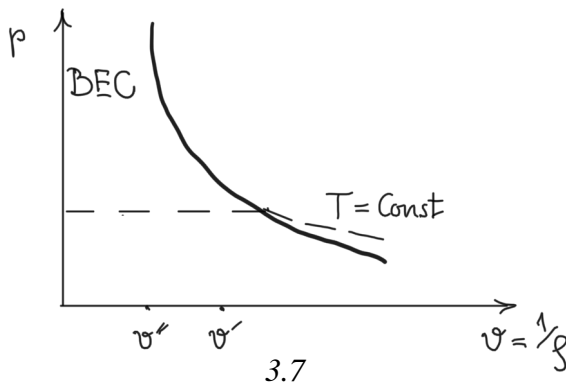
= $Const$ представља континуалан фазни прелаз. Сама уређена фаза се карактерише уређењем у реалном (координатном) простору са $ODLRO$.

Али БАК можемо карактерисати и као уређење у импулсном простору. Уз свако уређење постоји карактеристичан фазни прелаз из нормалне (без уређења) фазе у фазу са уређењем. Карактеризација преко $ODLRO$ (просторног уређења) је везана за прелаз на $\rho = Const$, док карактеризација преко уређења у импулсном простору везујемо за прелаз на $T = Const$ када мењамо N (или V) да би ушли у квантни режим. Ако је v (специфична запремина) $= 1/\rho$ у p, v дијаграму можемо схематски представити $\rho = Const$ прелазе у БАК:



на $v_1 = Const$ и $v_2 = Const$ али могући је улазак у БАК и кад $v_1 \rightarrow v_2$ тј. додавање честица на $T = Const$.

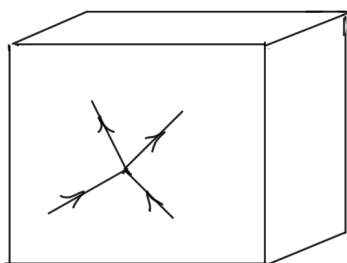
Како изражавамо једначину стања $p = p(V, N, T)$ у том случају? Користимо $\Omega = -\frac{2}{3} E$, однос који важи у случају идеалних гасова и термодинамичку једначину $\Omega = -pV$. Када смо у БАК фази важи $pV = \frac{2}{3} E = \frac{2}{3} \frac{3}{2} k_B T \frac{V}{\lambda_T^3} \zeta_{5/2}(1)$ тј. $p = p(T)$ и за $T = Const$, следи да $p = Const$ иако мењамо v !



Објашњење је једноставно – честице улазећи у систем улазе у кондензат и не уносе импулс и кинетичку енергију. $p = Const$ док $v' = \frac{N_0 + N_{exc}}{V}$, $v'' = \frac{N_0'' + N_{exc}}{V}$, ... У систему постоји фазна сепарација слично прелазима прве врсте када постоји изврстан интервал v у коме фазе коегзистирају и за који: $\left(\frac{\partial p}{\partial v}\right)_T = 0$.

(в) Зрачење црног тела

До сада смо разматрали бозоне као обичне честице чији број остаје исти – нема могућности настајања или нестајања честица.



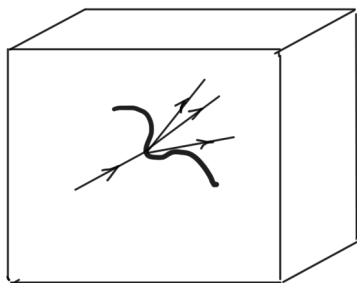
3.8

$$V, \mu, T$$

$$\hat{\rho} = \frac{e^{-\beta \hat{H} + \beta \mu \hat{N}}}{\text{tr}(e^{-\beta \hat{H} + \beta \mu \hat{N}})}$$

$\hat{\rho}$ смо преузели из класичне статистичке физике где $\hat{\rho}$ одређују интегрални (константе кретања). Дакле \hat{H} , \hat{N} класификују стања $|N, E_N\rangle$ и μ је независна варијаблиа и фиксира N (која је исто тако могућа независна варијаблиа).

Разматрајмо фотоне. У случају фотона, који (готово) не интерагују морамо да унесемо материју која их локализује и термализује (изазива сударе).



3.9

$$V, T$$

$$\hat{\rho} = \frac{e^{-\beta \hat{H}}}{\text{tr}(e^{-\beta \hat{H}})}$$

У интеракцији са материјом број фотона се не одржава, број честица није константа. Сходно томе $\mu = 0$ и N није независна варијабла коју можемо фиксирати.

Дакле $\mu = 0$ и узимамо у обзир да су фотони бозони са два дискретна степена слободе – две поларизације. Зато

$$E = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} \hbar\omega_k \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_k} - 1}, \quad \text{где } \omega_k = c|\vec{k}|.$$

Можемо описивати спектар на следећи начин који је убичајени начин описа *Planck*-овог закона:

$$\frac{dE}{V}(\omega, \omega + d\omega) = \frac{1}{\pi^2 c^2} \omega^2 \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} d\omega.$$

Једнаставним скалирањем долазимо до зависности $E(T)$ који описује *Boltzmann*-ов закон:

$$E \sim T^4.$$

Како мерити и описати ово зрачење које би долазило из једног извора (и увира)? Прво морамо претпоставити да су фотони у термодинамичкој равнотежи са материјом, да постоји једнакост између упадног и емитованог зрачења:

$$E_e(\textit{emitted}) = a E_i(\textit{incident}).$$

a је коефицијент апсорпције који зависи од природе материјала тела које апсорбује светлосте (али и зрачи). У случају потпуне апсорпције $a = 1$ - то је случај „црног тела“, које зрачи на начин универзалног *Planck*-овог предвиђања.

Можемо запазити да у случају фотона $\frac{N}{V} \sim T^3$ и зато $a \sim \frac{1}{T}$. На другој страни (опет) због линеарне дисперзије процена за термалну дужину је $\lambda_T \sim \frac{1}{T}$. Следи да $\lambda_T \sim a$ тј. систем је стално на прелазу (у критичном стању) из класичног у квантно понашање. Зато не можемо за $T \rightarrow \infty$ уводити $\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \approx \frac{1}{\beta\hbar\omega}$ јер би то водило тзв. „ултравиолетној катастрофи“ – дивергенцији спектра за велико $\hbar\omega$. Квантни опис и у том домену је важан.

(B) Идеални Ферми гас

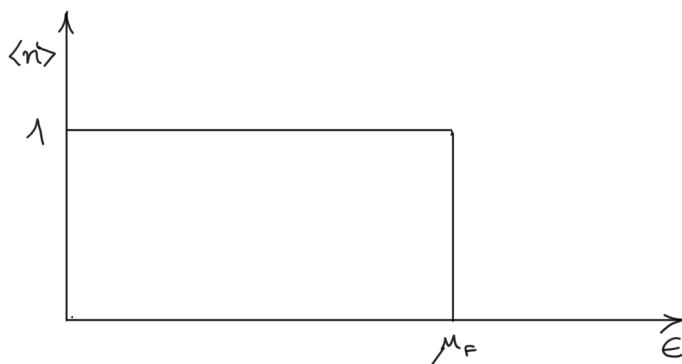
Разматрајмо фермионе са једночестичним стањима i које карактеришу ϵ_i (енергија) и σ (пројекција спина 1/2).

Квантни опис можемо увести и на следећи начин:

$$\hat{\rho} = \prod_i \hat{\rho}_i, \quad \hat{\rho}_i = \frac{e^{-\beta \hat{n}_i (\epsilon_i - \mu)}}{\text{tr}(e^{-\beta \hat{n}_i (\epsilon_i - \mu)})}$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{n}_i \rangle &= \text{tr}(\hat{n}_i \hat{\rho}) = \text{tr}(\hat{n}_i \hat{\rho}_i) = \sum_{n=0}^1 \frac{n e^{-\beta n (\epsilon_i - \mu)}}{\sum_{n=0}^1 e^{-\beta n (\epsilon_i - \mu)}} \\ &= \frac{1}{e^{\beta (\epsilon_i - \mu)} + 1}. \end{aligned}$$

Добили смо насељеност стања i са енергијом ϵ_i на начин Ферми-Дирак статистике. Посматрајмо систем фермиона на $T = 0$ са густином ρ :



3.10

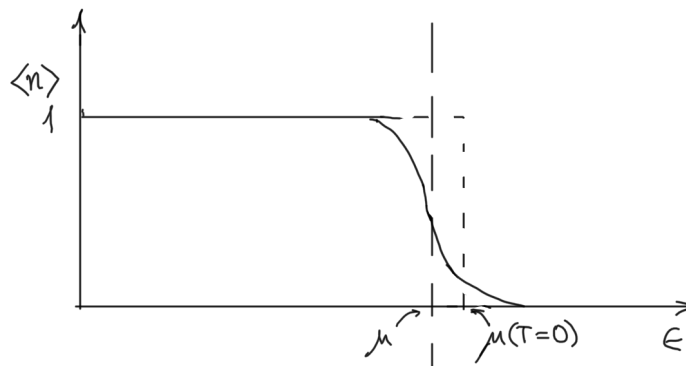
$$\rho = 2 \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \int_0^{p_F} dp p^2 = \frac{1}{\pi^2} \frac{p_F^3}{3} \sim \mu_F^{3/2}, \quad \text{где} \quad p_F = \sqrt{\frac{2m \mu_F}{\hbar^2}}.$$

$\Rightarrow p_F \left[\frac{1}{L} \right] \sim \frac{1}{a}$ тј. што већи p_F , тј. $\mu_F \equiv E_F$ (Ферми енергија) = $k_B T_F$, већа и густина.

$$E \sim E_F \cdot N \Rightarrow p \sim E_F \rho \sim \rho^{5/3}$$

Дакле $E, p \neq 0$ на $T = 0$.

За $T \neq 0$ можемо у различитим ситуацијама описивати расподелу на следећи начин:



3.11

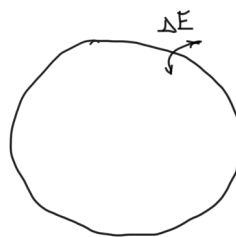
(тј. на начин мале деформације око μ_F), где $\mu(T) \approx \mu(T=0) \equiv \mu_F$, Ферми енергија, јер веома често $T \ll T_F$, и промена хемијског потенцијала је занемарљива.

Примери:

- (i) T_F електрона у металу је огромна $T_F \sim 10000 \text{ K}$ (велика густина електрона).
- (ii) Квантни опис „дегенерисаног Ферми гаса“ је неопходан и у разматрању еволуције звезда. Звезде се хладе (нуклеарне реакције престају) и „гравитациони колапс“ се може избећи само отпором услед статистике (кинетичком енергијом услед Паули блокирања) и то релативистичких електрона у случају белих патуљака и неутрона у случају неутронских звезда.
- (iii) У атомским језгрима притисак дегенерисаних фермиона – протона и неутрона делује насупрот привлачења јаке интеракције.
- (iv) И у случају разређених Ферми гасова у лабораторији, “cold atoms”, систем је дегенерисан и користимо квантни опис.

Ферми ниво је позорница ефективне физике:

- (i) Као што ћемо анализирати ту „додајемо“ топлоту кад температура расте.

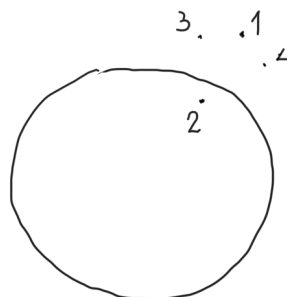


3.12

- (ii) Али и кад разматрамо интеракције чак и веома јаке, систем се може карактерисати *ексцитацијама – квазичестицама близу Ферми нивоа сличним онима у идеалном гасу* = опис на начин Ландау „Ферми течности“.

Све је то последица Паули блокирања (у коме је фермионима забрањено да буду у истом стању) и „ређање-попуњавање“ великог броја нивоа доводи да су електрони у унутрашњости „Ферми мора“ инертни. Илустроваћемо ту ситуацију следећим аргументом у прилог постојања „Ферми течности“ (*Ashcroft, Mermin, Solid State Physics*)

Посматрајмо елементарни процес када електрон 1 интерагује са 2 из Ферми сфере: $1, 2 \rightarrow 3, 4$



3.13

Желимо да проценимо вероватноћу да се тај процес догоди, да честица 1 више није у почетном стању. Вероватноћа је пропорционална величини дозвољеног фазног простора за тај процес. Користећи закон одржања енергије добијамо могући распон енергија две честице после судара:

$$\mathcal{E}_1 + \mathcal{E}_2 = \mathcal{E}_3 + \mathcal{E}_4, \mathcal{E}_i = \mathcal{E}_F + \Delta\mathcal{E}_i, i = 1, 2, 3, 4 \Rightarrow \mathcal{E}_3 + \mathcal{E}_4 < 2\mathcal{E}_F + \Delta\mathcal{E}_1 \Rightarrow \Delta\mathcal{E}_3, \Delta\mathcal{E}_4 < \Delta\mathcal{E}_1 \text{ Закључујемо: } \text{вероватноћа}$$

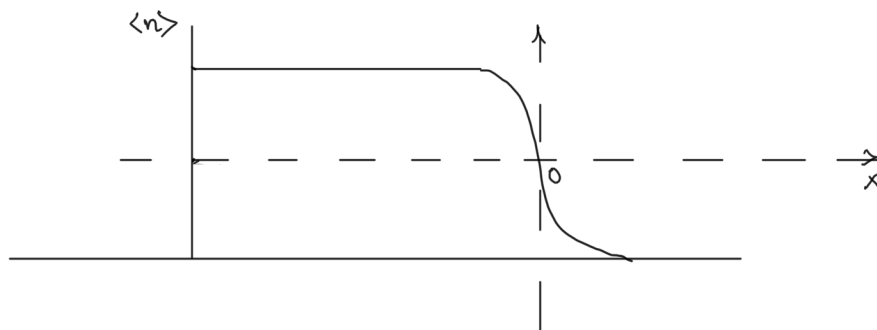
судара, која је обрнуто пропорционална очекиваном животу квазичестице τ , може се проценити,

$$\frac{1}{\tau} = a(\mathcal{E}_1 - \mathcal{E}_F)^2.$$

Честица на самом Ферми нивоу има бесконачан живот.

Ферми ниво је граница између честица и шупљина:

$$x = \beta(\epsilon - \mu)$$



3.14

$$\frac{1}{e^x + 1} = 1 - \frac{1}{\underbrace{e^{-x} + 1}_{\text{вероватноћа да је ниво празан (да постоји шупљина)}}}$$

Да би сазнали основне одлике система треба да решимо „главну једначину“:

$$N = 2 \sum_k \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} + 1},$$

и добијено $\mu = \mu(N, V, T)$, у зависности од уобичајених варијабли убацимо у израз за енергију:

$$E = 2 \sum_k \frac{\epsilon_k}{e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} + 1}.$$

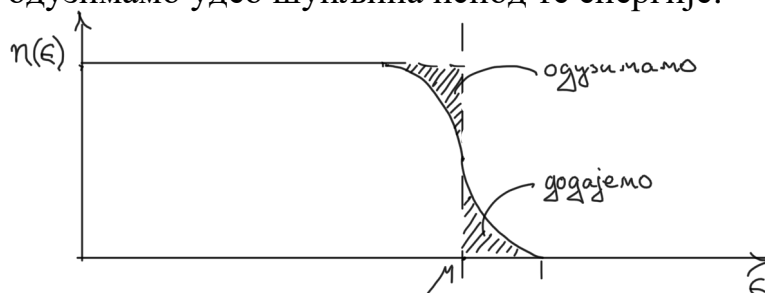
Интеграцију (у лимесу великог система) вршимо користећи варијаблу енергије, и њој придружену густину стања $g(\epsilon)$:

$$\frac{1}{V} 2 \sum_k \rightarrow 2 \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \int dk k^2 = \int d\epsilon g(\epsilon) \quad , \quad g(\epsilon) = c \sqrt{\epsilon}.$$

Потребно је да израчунамо интеграле облика:

$$I = \int_0^{\infty} d\epsilon \frac{f(\epsilon)}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} + 1},$$

са $f(\epsilon) = \epsilon^m$. Апроксимативно решење, *Sommerfeld*-ов развој, описаћемо у наставку. Решење се организује око Ферми расподеле на $T = 0$, $n(\epsilon) = \theta(\mu - \epsilon)$; интегралу са том расподелом додајемо удео од честица које су изнад енергије μ , а одузимамо удео шупљина испод те енергије:



3.15

$$x = \beta(\epsilon - \mu), \epsilon = \mu + \frac{x}{\beta}$$

$$\begin{aligned} I &= \frac{1}{\beta} \int_{-\mu\beta}^0 dx \frac{f\left(\mu + \frac{x}{\beta}\right)}{e^x + 1} + \frac{1}{\beta} \int_0^{\infty} dx \frac{f\left(\mu + \frac{x}{\beta}\right)}{e^x + 1} \\ &= \frac{1}{\beta} \int_{-\mu\beta}^0 dx f\left(\mu + \frac{x}{\beta}\right) - \frac{1}{\beta} \int_{-\mu\beta}^0 dx \frac{f\left(\mu + \frac{x}{\beta}\right)}{e^{-x} + 1} + \frac{1}{\beta} \int_0^{\infty} dx \frac{f\left(\mu + \frac{x}{\beta}\right)}{e^x + 1} \\ &= \int_0^{\mu} d\epsilon f(\epsilon) - \frac{1}{\beta} \int_0^{\beta\mu} dx \frac{f\left(\mu - \frac{x}{\beta}\right)}{e^{-x} + 1} + \frac{1}{\beta} \int_0^{\infty} dx \frac{f\left(\mu + \frac{x}{\beta}\right)}{e^x + 1} \end{aligned}$$

На овом месту уводимо апроксимацију: у другом интегралу горњу границу преводимо у бесконачност: $\beta\mu \rightarrow \infty$. (Претпостављамо ниске температуре.)

Процена грешке је

$$\int_{\beta\mu}^{\infty} e^{-x} x^m dx \sim (\beta\mu)^m e^{-\beta\mu},$$

што тежи брже у нулу од било које зависности типа $\frac{1}{(\beta\mu)^m}$ кад $\beta\mu \rightarrow \infty$.

Применом апроксимације добијамо *Sommerfeld*-ов развој:

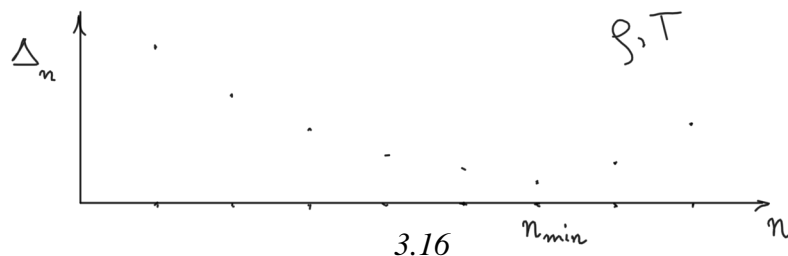
$$\begin{aligned} & \int_0^\infty d\epsilon \frac{f(\epsilon)}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} + 1} \\ & \approx \int_0^\mu d\epsilon f(\epsilon) + \frac{1}{\beta} \int_0^\infty dx \frac{1}{e^x + 1} \sum_{n=1}^\infty \frac{f^{(2n-1)}(\epsilon)}{(2n-1)!} \Big|_{\epsilon=\mu} 2 \left(\frac{x}{\beta}\right)^{(2n-1)} \\ & = \int_0^\mu d\epsilon f(\epsilon) + \frac{1}{\beta^2} f'(\epsilon) \Big|_{\epsilon=\mu} \frac{\pi^2}{6} + \dots \end{aligned}$$

За добијање прве поправке:

$$\int_0^\infty \frac{x}{e^x + 1} = \int_0^\infty \frac{x e^{-x}}{1 + e^{-x}} = \sum_{m=1}^\infty \frac{(-1)^{m+1}}{m^2} = \left(1 - \frac{1}{2}\right) \zeta_2(1).$$

Sommerfeld-ов развој је асимптотски развој:

Схематски такав развој можемо да прикажемо девијацијом од егзактног резултата Δ_n при апроксимацији са n чланова, на фиксираним ρ и T :



Како $T \rightarrow 0$ тако и број чланова у апроксимацији са најмањом девијацијом (n_{min}) расте и понашање је блиско конвергентном реду.

Примењујући *Sommerfeld*-ов развој у случају израчунавања броја честица тј. густине добијамо

$$\frac{\rho}{c} \approx \frac{2}{3} \mu^{3/2} + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \frac{1}{2\sqrt{\mu}} \approx \left(\frac{\rho}{c}\right)_{T=0} = \frac{2}{3} \mu_0^{3/2}, \text{ где } \mu_0 \equiv \mu(T=0).$$

За енергију по јединици запремине, ϵ , добијамо

$$\frac{\epsilon}{c} \approx \frac{2}{5} \mu^{5/2} + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \frac{3}{2} \sqrt{\mu}.$$

Користимо $\mu^m \approx \mu_0^m + m \mu_0^{m-1} (\mu - \mu_0)$ и следи:

$$\mu \approx \mu_0 - \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \frac{1}{2} \frac{1}{\mu_0},$$

$$\frac{\epsilon}{c} \approx \frac{2}{5} \mu_0^{5/2} + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \sqrt{\mu_0},$$

$$\frac{\delta\epsilon}{c} \approx \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \sqrt{\mu_0} = \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \frac{1}{\mu_0} \left(\frac{\rho}{c} \frac{3}{2} \right) \Rightarrow$$

$$\delta\epsilon = \frac{\pi^2}{4} \rho (k_B T) \cdot \left(\frac{k_B T}{\mu_0} \right).$$

Можемо да закључимо да промена унутрашње енергије у односу на износ на $T = 0$ се своди на ексцитације блиске Ферми нивоу просечне енергије $(k_B T)$ чији број можемо проценити односом $\left(\frac{k_B T}{\mu_0} \right)$. Закључујемо да је топлотни капацитет облика c_V (идеалан Ферми гас) $= \gamma T$.

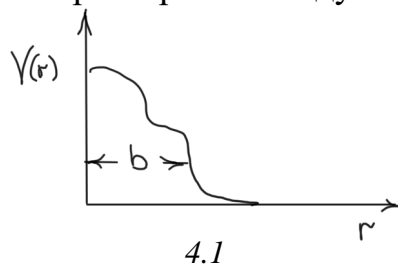
Та зависност се може детектовати у металима на ниским температурама – на већим доминантан је удео фонона, осцилација атома у кристалној решетци: $c_V(\text{метал}) = \gamma T + \alpha T^3$.

4. Ферми системи и интеракције

(А) Разређени Ферми гас

Да би упознали основне последице присуства интеракција у Ферми системима разматраћемо разређени Ферми гас. До краја двадесетог века, до стварања система хладних атома у лабораторији, разређени Ферми гас је био само теоријски концепт, јер у природи, на ниским температурама очекујемо кондензацију система Ферми атома (системи су „гушћи“ и ефекти интеракције су јачи).

Како дефинишемо – описујемо разређени Ферми гас? Нека интеракцију међу честицама дефинише нека карактеристична дужина b :



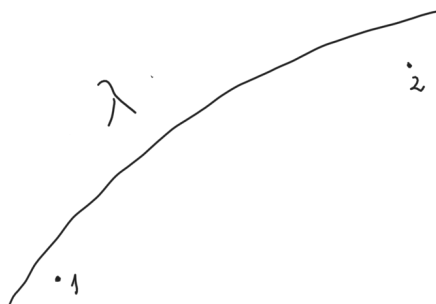
У разређеном Ферми гасу ефективни радијус интеракције је мали у односу на средње растојање међу честицама:

$$b \ll \left(\frac{V}{N}\right)^{1/3}.$$

Две ефективне (карактеристичне) дужине дају две ефективне скале енергије тј. импулса:

$$\frac{1}{b} \gg \left(\frac{N}{V}\right)^{1/3} \sim k_F \sim \frac{1}{\lambda_F}.$$

И ако разматрамо интеракцију између две честице можемо да закључимо да су у питању судари ниских енергија („спори судари“) или судари великих таласних дужина:

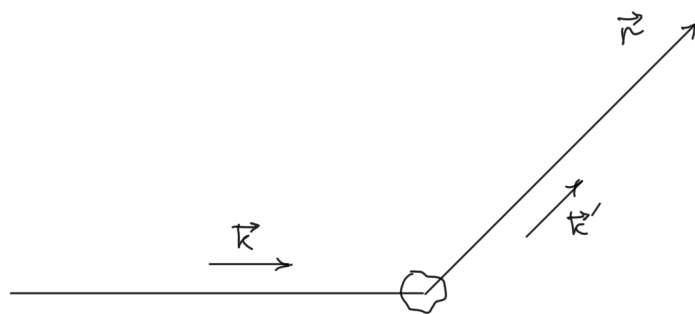


4.2

У опису Ферми честица постоји велика размазаност координате и интеракциони потенцијал(и) се свде на мале сфере – тачке у простору и очекујемо тзв. *s-wave* сударе.

Разматраћемо разређени Ферми гас као ефективно двочестични проблем (иако је многочестични) и тражити ефективни опис тј. доминантну физику – физику на великим растојањима или са малим импулсима и енергијама.

Почињемо са описом система две честице које карактерише релативно одстојање \vec{r} и одговарајућа таласна функција $\Psi(\vec{r})$ релативног кретања. На великим растојањима, и кад је интеракција ограниченог димета, интеракцију = судар две честице релативног импулса \vec{k} , чија вредност се одржава (еластични судар), можемо да опишемо на следећи начин:



4.3

$$\lim_{|\vec{r}| \rightarrow \infty} \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \sim e^{i\vec{k}\vec{r}} + f(\vec{k}', \vec{k}) \frac{e^{i|\vec{k}|\cdot|\vec{r}|}}{|\vec{r}|}$$

$$|\vec{k}| = |\vec{k}'|, \quad \vec{k}' = |\vec{k}| \cdot \frac{\vec{r}}{|\vec{r}|}, \quad \text{и где}$$

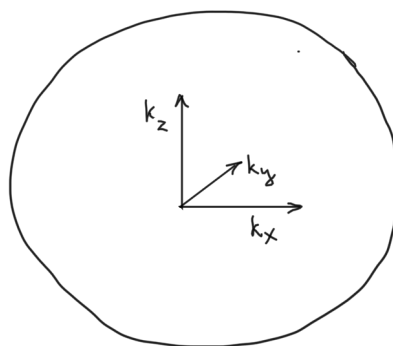
$f(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{m}{4\pi\hbar^2} \int d\vec{r} e^{-i\vec{k}'\vec{r}} V(\vec{r}) \Psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ је амплитуда расејања.

Горњим једначинама опис судара смо само дали у интегралном облику (без решења). У нашим разматрањима основна апроксимација биће *Vorn*-ова апроксимација када у изразу за $f(\vec{k}', \vec{k})$ узимамо $\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \approx e^{i\vec{k}\vec{r}}$. Ова апроксимација је неприменљива за “*hard-core*” потенцијале (бесконачне јачине а ограничене просторно). Како је ефективни радијус интеракције (b) мали тј. интеграција је ограничена просторно у $f(\vec{k}', \vec{k})$ и важи $\frac{b}{\lambda_F} \ll 1$ (разређени гас), можемо сматрати да $|\vec{k}| \approx 0$ и зато $f(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{m}{4\pi\hbar^2} V(0)$. Иначе у опису разређених гасова (Ферми и Бозе), можемо говорити о карактеристичној константи, „дужини расејања“ a , где $a = -f(\vec{k}', \vec{k})$, и ми смо израчунали њену вредност у Борновој апроксимацији.

Због $\frac{a}{\lambda_F} \ll 1$ (a је дужина расејања) не очекујемо значајну корекцију $\Psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ приликом судара. Зато основно стање система у првој апроксимацији је *Slater*-ова детерминанта равних таласа у којој је укључен спински степен слободе:

$$\Psi_{\vec{k}_1, \dots, \vec{k}_N}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \frac{e^{i\vec{k}_1\vec{r}_1}}{\sqrt{V}} \chi_1 & \frac{e^{i\vec{k}_1\vec{r}_2}}{\sqrt{V}} \chi_1 & \dots \\ \frac{e^{i\vec{k}_2\vec{r}_1}}{\sqrt{V}} \chi_2 & \frac{e^{i\vec{k}_2\vec{r}_2}}{\sqrt{V}} \chi_2 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix}.$$

То је стање које одговара Ферми сфери у \vec{k} простору, када су стања најмање кинетичке енергије попуњена, и то свако такво стање са обе пројекције спина, $\chi = |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$.



4.4

Да би добили енергију основног стања система у првом реду пертурбационог развоја где интеракција представља пертурбацију, крећемо од израза за Хамилтонијан у другој квантизацији:

$$\hat{H} = \hat{H}_K + \hat{H}_V = \sum_{\vec{k}, \sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{\sigma}^{\dagger}(\vec{k}) a_{\sigma}(\vec{k}) + \frac{1}{2V} \sum_{\substack{\vec{q}, \vec{k}_1, \vec{k}_2 \\ \sigma_1, \sigma_2}} V(\vec{q}) a_{\sigma_1}^{\dagger}(\vec{k}_1 + \vec{q}) a_{\sigma_2}^{\dagger}(\vec{k}_2 - \vec{q}) a_{\sigma_2}(\vec{k}_2) a_{\sigma_1}(\vec{k}_1).$$

Означимо са $|FS\rangle$ - основно стање система – Ферми сферу у инверзном простору импулса.

$$\langle FS | \hat{H}_K | FS \rangle = \frac{3}{5} E_F N.$$

Да би израчунали $\langle FS | \hat{H}_V | FS \rangle$ морамо израчунати

$$\langle FS | a_{\sigma_1}^{\dagger}(\vec{k}_1 + \vec{q}) a_{\sigma_2}^{\dagger}(\vec{k}_2 - \vec{q}) a_{\sigma_2}(\vec{k}_2) a_{\sigma_1}(\vec{k}_1) | FS \rangle.$$

Аниhilационим операторима стварамо две шупљине у Ферми сфери - стању $|FS\rangle$. Да би повратили стање $|FS\rangle$ (креацијом две честице) разматрамо две могућности за ненулту вредност:

(а) „директни допринос“ када

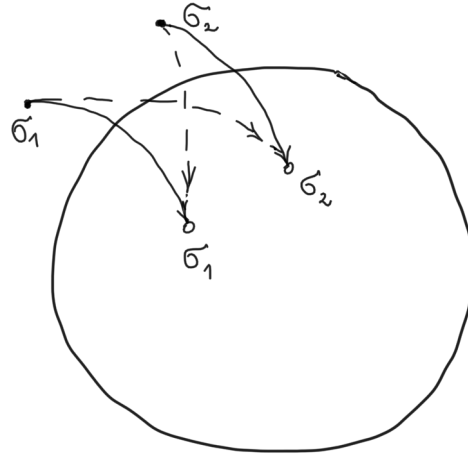
$$\vec{k}_1 + \vec{q} = \vec{k}_1 \quad \text{и} \quad \vec{k}_2 - \vec{q} = \vec{k}_2, \quad \text{тј.} \quad \vec{q} = 0 \quad \text{и}$$

(б) „изменски допринос“ када

$\vec{k}_1 + \vec{q} = \vec{k}_2$ и $\vec{k}_2 - \vec{q} = \vec{k}_1$, тј. $\vec{q} = \vec{k}_2 - \vec{k}_1$ уз неопходно $\sigma_1 = \sigma_2$.

Применом антикомутационих релација међу операторима добијамо:

$$\langle FS | a_{\sigma_1}^\dagger(\vec{k}_1 + \vec{q}) a_{\sigma_2}^\dagger(\vec{k}_2 - \vec{q}) a_{\sigma_2}(\vec{k}_2) a_{\sigma_1}(\vec{k}_1) | FS \rangle = \delta_{q,0} + (-1) \delta_{\sigma_1, \sigma_2} \delta_{\vec{q}, \vec{k}_2 - \vec{k}_1}.$$



4.5

$$E_V = \frac{1}{2V} V(0) \sum_{\substack{\vec{k}_1, \vec{k}_2 \\ \sigma_1, \sigma_2}} 1 - \frac{1}{2V} \sum_{\substack{\vec{k}_1, \vec{k}_2 \\ \sigma}} V(\vec{k}_2 - \vec{k}_1).$$

Директан део би добили и класично – без антисиметризације. Изменски део је последица Ферми статистике и представља допринос са негативним знаком јер преимућство Ферми статистике је да држи честице одвојено и тиме смањује енергију интеракције. За ту појаву неопходно је да фермиони имају исту пројекцију спина и тиме изменски део фаворизује феромагнетизам.

У случају разређеног Ферми гаса: $\frac{1}{a} \gg k_F$ и можемо узети да $V(\vec{k}_2 - \vec{k}_1) \approx V(0) = \int d\vec{r} V(\vec{r})$. Применом Борнове апроксимације у условима разређеног Ферми гаса важи (како смо претходно објаснили) $a = \frac{m}{4\pi\hbar^2} V(0)$. Даљим сређивањем доприноса добијамо за унутрашњу енергију система у првом реду теорије пертурбације следећи израз,

$$\frac{E}{N} = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \left(\frac{3}{5} + \frac{2}{3} (k_F a) + \dots \right),$$

у коме $k_F a$ представља мали параметар пертурбационог развоја који карактерише овај систем.

Напомена 1. Овакав развој карактерише и сингуларну “*hard-core*” интеракцију када сумирањем бесконачног низа сингуларних чланова долазимо до „ренормализоване интеракције“ са ефективним радијусом a .

Напомена 2. На веома ниским температурама, може се показати да разређени Ферми гас је у суперпроводној фази (*Kagan, Chubukov, JETP Lett. 47, 614 (1988)*), са Куперовим паровима фермиона паралелних спинова. Дакле ефективно постоји мали праг за наш опис – релевантан је за температуре $T > T_c$ (критична температура за суперпроводну фазу). Како се приближавамо $T = 0$ и колективни ефекти а не само судари две честице су важни.

(Б) Hartree-Fock метода

Основна претпоставка *Hartree-Fock* (ХФ) методе је да основно стање Ферми система можемо да апроксимирамо јединственом (само једном) *Slater* детерминантом. Извођење једначина ХФ биће дато по *Ashcroft, Mermin, Solid State Physics*.

По претпоставци основно стање можемо изразити у следећем облику

$$\Psi_0(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \Psi_1(\vec{r}_1) & \dots & \Psi_1(\vec{r}_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \Psi_N(\vec{r}_1) & \dots & \Psi_N(\vec{r}_N) \end{vmatrix}$$

где $\{\Psi_i(\vec{r}); i = 1, \dots, N\}$ представљају једночестична стања.

У општем случају основно стање је суперпозиција *Slater* детерминанти. ХФ метод је добар ако немамо велике колективне ефекте, нпр. неколико електрона у атому. ХФ не може да опише основно стање система у којима су колективни ефекти изражени: електрони у металу, Helium-3 атоми на ниским температурама, системи са Куперовим паровима, јако корелисани системи ... При слабијим интеракцијама, нпр. у разређеном Ферми гасу метод је први корак пре даљих разматрања.

Када примењујемо ХФ метод одговарајућа једночестична стања $\{|\Psi_i\rangle\}$ или $\{\Psi_i(\vec{r})\}$, $i = 1, \dots, N$ где $\langle \Psi_i | \Psi_j \rangle = \delta_{i,j}$ се добијају из минимизације са

$$|\Psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{i_1}^N \cdots \sum_{i_N}^N \epsilon_{i_1 \dots i_N} |\Psi_{i_1}\rangle \times \cdots \times |\Psi_{i_N}\rangle,$$

где $\epsilon_{i_1 \dots i_N}$ је *Levi-Civita* симбол, величине

$$\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = E[\{\Psi_i(\vec{r}); i = 1, \dots, N\}],$$

при условима $\langle \Psi_i | \Psi_i \rangle = 1$, $i = 1, \dots, N$. (Ортогоналност стања је загарантована самим тим што радимо са *Slater* детерминантама.)

Другим речима, радећи у координатној репрезентацији, потребна је минимизација функционала $E[\{\Psi_i(\vec{r}), \Psi_i^*(\vec{r})\}]$ уз захтев да $\int d\vec{r} |\Psi_i(\vec{r})|^2 = 1$, $i = 1, \dots, N$.

Због тога примењујући метод *Lagrange* умножака захтевамо стационарност функционала

$F[\{\Psi_i(\vec{r}), \Psi_i^*(\vec{r}); \mathcal{E}_i\}] = E[\{\Psi_i(\vec{r}), \Psi_i^*(\vec{r})\}] - \sum_i \mathcal{E}_i (\int d\vec{r} |\Psi_i(\vec{r})|^2 - 1)$, где су $\Psi_i(\vec{r}), \Psi_i^*(\vec{r})$ независне варијабле а \mathcal{E}_i *Lagrange* умножци.

Да би извели ХФ једначине почињемо са уобичајеним Хамилтонијаном, са кинетичким и интеракционим делом, $\hat{H} = \hat{K} + \hat{V}$, где $\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{m \neq n}^N V(\vec{r}_m - \vec{r}_n)$.

Можемо разматрати било који пар честица, при израчунавању доприноса функционалу интеракционог дела, јер ће допринос бити исти за сваки пар:

$$\langle \Psi | V_{12} | \Psi \rangle = \int d\vec{r}_1 \cdots \int d\vec{r}_N |\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)|^2 V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|).$$

У *Slater* детерминанти сумираћемо по пермутацијама честица (уместо стања што је еквивалентно). Подинтегралну функцију схематски можемо приказати на следећи начин:

$$\frac{1}{\sqrt{N!}} \left(\sum_P \cdots \right) \frac{1}{\sqrt{N!}} \left(\sum_{P'} \cdots \right) V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|),$$

и због ортогоналности једночестичних стања (која су нормирана) ефективно с функција се своди на:

$$\frac{1}{N!} \sum_{P,P'} (\delta_{P,P'} - \delta_{P,P' \cdot E(1,2)}) \dots V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|).$$

Дакле имаћемо само два нетривијална доприноса: (а) када су пермутације са леве и десне стране исте и (б) када се пермутације разликују до на измену честица 1 и 2. Пермутацију P можемо да опишемо доделом честица стањима $\{\Psi_i; i = 1, \dots, N\}$.

$$P: (\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_i(\vec{r}_1), \dots, \Psi_j(\vec{r}_2), \dots)$$

Ако смо изабрали два стања за честице 1 и 2, стање i за честицу 1 и стање j за честицу 2 (на $N(N-1)$ начина), за сваки такав избор постоје $(N-2)!$ пермутације по осталим честицама које дају идентичан допринос. Дакле сумирамо по свим могућим паровима стања (i, j) :

$$\langle \Psi | V_{12} | \Psi \rangle = \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \frac{1}{N(N-1)} \sum_{i \neq j} \left(|\Psi_i(\vec{r}_1)|^2 |\Psi_j(\vec{r}_2)|^2 - \Psi_i^*(\vec{r}_1) \Psi_i(\vec{r}_2) \Psi_j^*(\vec{r}_2) \Psi_j(\vec{r}_1) \right),$$

и за сваки пар постоји директни и изменски део. Ако честице имају спински степен слободе, у изменском делу појављују се скаларни производи у спинском простору: $\langle \sigma_i | \sigma_j \rangle_1 \langle \sigma_j | \sigma_i \rangle_2$ тј. стања спина морају бити иста: $\delta_{\sigma_i, \sigma_j}$.

Тако добијамо да је удео интеракције у $E[\{\Psi_i(\vec{r}), \Psi_i^*(\vec{r})\}]$ следећег облика

$$\langle \Psi | \hat{V} | \Psi \rangle = \sum_{i \neq j} \frac{1}{2} \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \left(|\Psi_i(\vec{r}_1)|^2 |\Psi_j(\vec{r}_2)|^2 - \delta_{\sigma_i, \sigma_j} \Psi_i^*(\vec{r}_1) \Psi_i(\vec{r}_2) \Psi_j^*(\vec{r}_2) \Psi_j(\vec{r}_1) \right).$$

Сличним разматрањем можемо добити и очекивану вредност кинетичке енергије.

$$E[\{\Psi_i(\vec{r}), \Psi_i^*(\vec{r})\}] = \sum_{j=1}^N \int d\vec{r} \Psi_j^*(\vec{r}) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \right) \Psi_j(\vec{r}) + \frac{1}{2} \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \sum_{i \neq j} \left(|\Psi_i(\vec{r}_1)|^2 |\Psi_j(\vec{r}_2)|^2 - \delta_{\sigma_i, \sigma_j} \Psi_i^*(\vec{r}_1) \Psi_i(\vec{r}_2) \Psi_j^*(\vec{r}_2) \Psi_j(\vec{r}_1) \right).$$

Из стационарности $F[\{\Psi_i(\vec{r}), \Psi_i^*(\vec{r}); \mathcal{E}_i\}] = E[\{\Psi_i(\vec{r}), \Psi_i^*(\vec{r})\}] - \sum_i \mathcal{E}_i (\int d\vec{r} |\Psi_i(\vec{r})|^2 - 1)$, $\delta F = 0$, када варирамо независно Ψ_k^* и Ψ_k добијамо ХФ једначине:

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \sum_{i(\neq k)} \int d\vec{r}' |\Psi_i(\vec{r}')|^2 V(|\vec{r} - \vec{r}'|) \right] \Psi_k(\vec{r})$$

$$- \sum_{i(\neq k)} \delta_{\sigma_i, \sigma_k} \int d\vec{r}' \Psi_i^*(\vec{r}') \Psi_k(\vec{r}') V(|\vec{r} - \vec{r}'|) \Psi_i(\vec{r}) = \mathcal{E}_k \Psi_k(\vec{r}).$$

(Одређење $i \neq k$ није неопходно јер се доприноси потиру за $i = k$.) Можемо приметити да енергија основног стања (у ХФ апроксимацији) није сума по \mathcal{E}_k , тј. $\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = E_{HF} \neq \sum_j \mathcal{E}_j$! Заиста (интеграцијом ХФ једначине)

$$\mathcal{E}_j = \mathcal{E}_j^k + \sum_{i(\neq j)} (V_{ij}^e - V_{ij}^d),$$

а само

$$E_{HF} = \sum_j \mathcal{E}_j^k + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} (V_{ij}^e - V_{ij}^d).$$

Шта представља \mathcal{E}_l ?

$$\mathcal{E}_l = \mathcal{E}_l^k + \sum_{i(\neq l)} (V_{il}^e - V_{il}^d) = E_{HF}^l(N+1) - E_{HF}(N),$$

тј. представља промену ХФ енергије при уношењу или уклањању електрона у орбитали l тзв. јонизујући потенцијал.

(В) Магнетизам

Разматрајмо Дираков Хамилтонијан у лимесу $E - mc^2 \ll mc^2$, у присуству електромагнетног поља (\vec{A}):

$$\hat{H} = \frac{(\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A})^2}{2m} - \frac{q \hbar}{2m c} \vec{\sigma} (\vec{\nabla} \times \vec{A}).$$

Zeeman-ов члан: $-\vec{\mu}_s \vec{B} = -\frac{q \hbar}{2m c} \vec{\sigma} (\vec{\nabla} \times \vec{A})$ описује интеракцију спина са магнетним пољем. У случају електрона, $q = -e$, спински магнетни моменат се може изразити на следећи начин, $\vec{\mu}_s = -\mu_B \left(g \frac{\vec{S}}{\hbar} \right)$ где спин је $\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$, $g = 2$ и $\mu_B = \frac{e \hbar}{2m c}$ је *Bohr*-ов магнетон. Дакле у самом Хамилтонијану, у опису интеракције са \vec{B} , поред орбиталног дела постоји и спински део са унутрашњим магнетним моментом. Спински магнетни моменат електрона је

главни узрок магнетизма у материјалима. Зато ћемо опису спинског магнетизма посветити највећу пажњу.

Уопште магнетни моменат неког система можемо дефинисати као одзив – одговор на присуство \vec{B} :

$$\vec{M} = -\frac{1}{N} \frac{\partial F}{\partial \vec{B}},$$

где F је слободна енергија система честица у континууму или на кристалној решетци. Опис интеракције са спином је облика $H_Z \sim \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{B}$, где i је i – та честица или i – ти чвор у решетци. Самим тим магнетизација услед спинског степена слободе је дата преко очекиване вредности спина,

$$\vec{M} \sim \langle \vec{S}_i \rangle,$$

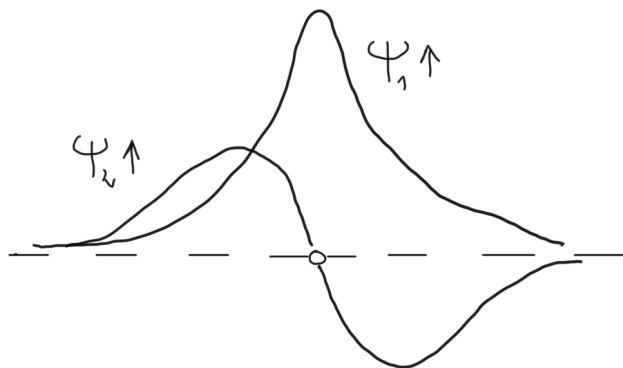
где је i произвољно ако је систем хомоген и инваријантан на translације. Ако у основном стању $|\Psi_0\rangle$ или на коначној температури ($\hat{\rho}$),

$$\langle \vec{S}_i \rangle \neq 0,$$

симетрија $SO(3)$ је нарушена јер под утицајем ротације $R_{lm} \in SO(3)$: $R_{lm} \langle S^l \rangle = \langle S^m \rangle$.

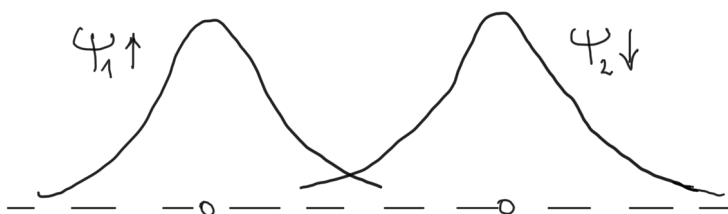
Како може доћи до нарушења симетрије у систему електрона? Разматрајмо два основна модела који описују настанак уређења (поларизације) спина електрона везаних за атоме.

- (i) Два електрона су везана за један атом: орбитале су ортогоналне $\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = 0$ али се просторно преклапају.



Због „директне измене“ настаје појава феромагнетног уређења. Као и у претходним разматрањима (изменског доприноса енергији), утицај интеракције међу електронима је смањен између електрона са истим спином.

- (ii) Два електрона у систему са два атома (*Heitler-London* опис молекула H_2). $\Psi_1(\vec{r}), \Psi_2(\vec{r})$ су локализоване али не ортогоналне таласне функције:



4.7

Електрони могу да редукују кинетичку енергију преласком са једног на други атом и за то је неопходно да су супротних спинова. Та појава је у основи антиферомагнетног уређења спина електрона. Најпознатији пример такве појаве и уређења је *Hubbard*-ов модел електрона на кристалној решетки уз услове да је кристална решетка полупопуњена и да је интеракциони део доминантан. *Hubbard*-ов модел дефинишемо преко следећег Хамилтонијана:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}) + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}.$$

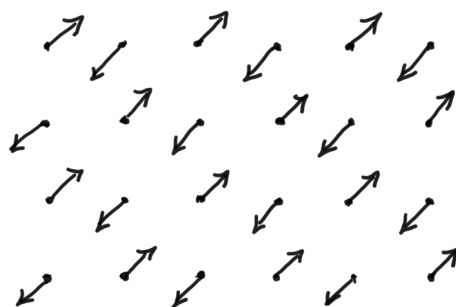
Параметар t (*hopping parameter*) описује кретање, могућност преласка електрона на суседни чвор, док U (*on-site interaction*) описује интеракцију коју електрони трпе ако су се нашли са другим електроном (супротног спина) на истом чвору.

У лимесу $U \gg t$ и кад просечно имамо један електрон по чвору, Хамилтонијан постаје ефективно следећи,

$$H_{ef} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j,$$

где $J < 0$, $|J| \sim \frac{t^2}{U}$, описује антиферомагнетну интеракцију сваког спина (електрона) са спиновима (електронима) на суседним чворовима у решетки.

Можемо се упитати да ли класично антиферомагнетно уређење тзв. *Neel* стање ($|\Psi_N\rangle$) описује основно стање система.



4.8

Ако напишемо интеракцију два спина на следећи начин,

$$\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = S_i^z S_j^z + \frac{S_+^i S_-^j + S_-^i S_+^j}{2},$$

увиђамо да задњи члан делује нетривијално на $|\Psi_N\rangle$ – уноси тзв. квантне флукуације и спречава да то стање буде својствено стање Хамилтонијана.

Иначе магнетно уређење у овом систему можемо дефинисати на следећи начин:

$$|\vec{M}\rangle = \frac{1}{N} |\langle \Psi_0 | \sum_i (-1)^i \vec{S}_i | \Psi_0 \rangle$$

где $(-1)^i$ мења знак у зависности од парности чвора i . У основном стању, $|\Psi_0\rangle$, $|\vec{M}\rangle < \frac{1}{2}$. ($|\Psi_0\rangle \neq |\Psi_N\rangle$)

У општем случају J може бити било ког знака, и такав модел интеракције међу спинским степенима слободе (произвољног спина, не само $s = \frac{1}{2}$) је познат као Хајзенбергов модел. Микроскопска разматрања разних врста измене у опису спинског магнетизма разних материјала воде до ефективних и феромагнетних и антиферомагнетних интеракција. Разматраћемо Хајзенбергов модел када је $J > 0$ тј. када је интеракција феромагнетна:

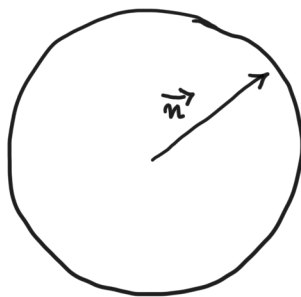
$$H_H = -J \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j,$$

и подразумевамо интеракцију само међу најближим суседима.

Нека је $|\chi\rangle$ произвољни (нормирани) двокомпонентни спинор. Једно од могућих основних стања система можемо описати на следећи начин,

$$|\Psi_0\rangle = |\chi\rangle_1 \times |\chi\rangle_2 \times \dots \times |\chi\rangle_N.$$

Ово *eigen*-стање је везано за правац: $\vec{n} = \langle \Psi | \vec{\sigma} | \Psi \rangle$ и важи $\vec{S}_i \cdot \vec{n} |\Psi\rangle_i = \frac{\hbar}{2} |\Psi\rangle_i$, $i = 1, \dots, N$.



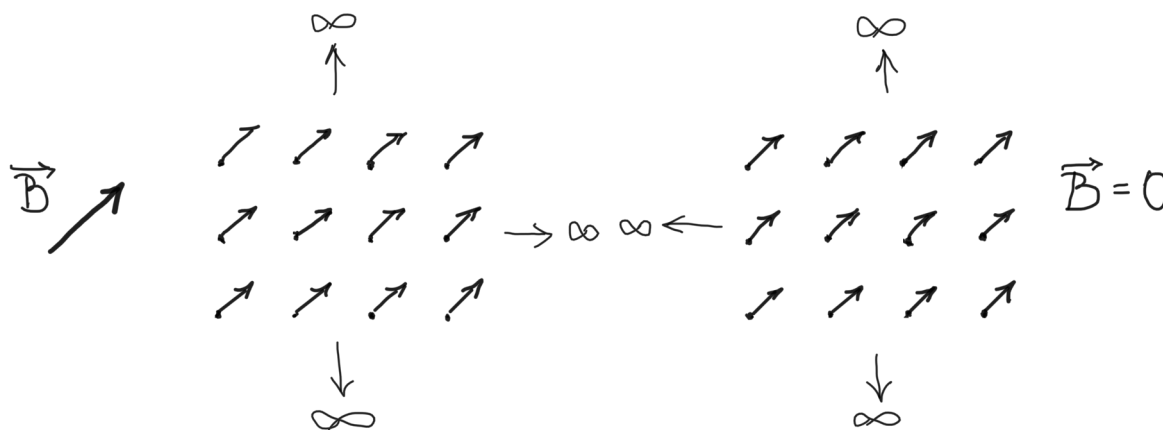
4.9

Спонтано нарушење симетрије:

Уведимо спољашње магнетно поље у Хамилтонијан,

$$H_H \rightarrow H_H - \sum_i \vec{\mu}_i^s \cdot \vec{B},$$

и разматрајмо модел на довољно ниској температури када очекујемо магнетно уређење:



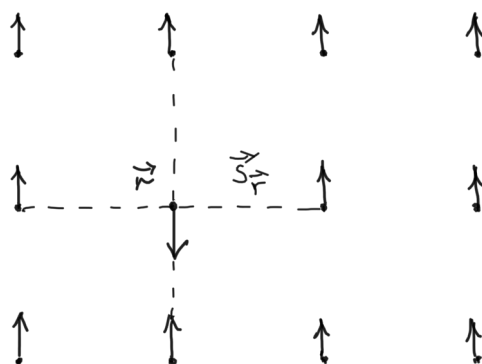
4.10

Спонтано нарушење симетрије можемо описати као појаву да у термодинамичком лимесу, без присуства \vec{B} , систем има магнетизацију.

Зашто је потребан лимес великог система, V (запремина) $\rightarrow \infty$? У коначном систему $\langle \Psi(\chi_1) | \Psi(\chi_2) \rangle \neq 0$ и систем ће моћи да прелази из \vec{n}_1 у \vec{n}_2 итд., и на тај начин ће „рестаурирати“ симетрију. Кад $V = \infty$, може се показати да $\langle \Psi(\chi_1) | \Psi(\chi_2) \rangle = 0$, дакле \vec{n} је фиксирано и симетрија је нарушена!

У Хајзенберговом моделу нарушена симетрија је $SO(3)$ – континуална симетрија. Када је нарушена симетрија континуална нарушење прати појава Голдстонових мода – мода без енергетског процепа у случају интеракција (J) кратког домета.

Голдстонове моде у случају квантних магнета називамо спински таласи. Разматрајмо елементарни процес у коме је промена спина минимална и ексцитовно стање је својствено стање спина (*Ashcroft, Mermin* књига):



4.11

$$\hat{H}_H = -\frac{J}{2} \sum_{i,j=1}^N \left(S_i^z S_j^z + \frac{s_+^i s_-^j + s_-^i s_+^j}{2} \right),$$

$$\hat{H}_H | \uparrow \uparrow \uparrow \dots \rangle = E_0 | \uparrow \uparrow \uparrow \dots \rangle,$$

$$\hat{H}_H | \uparrow \uparrow \downarrow_{\vec{r}} \uparrow \uparrow \dots \rangle = \left(E_0 + Z \frac{J}{2} \right) | \uparrow \uparrow \downarrow_{\vec{r}} \uparrow \uparrow \dots \rangle - \frac{J}{2} \sum_{\vec{s}_r} | \uparrow \uparrow \downarrow_{\vec{s}_r} \uparrow \uparrow \dots \rangle,$$

где сума по \vec{s}_r је сума по најближим суседима чвора \vec{r} . Број суседних чворова обележавамо са Z . Вектори \vec{s}_r (отклони од вектора \vec{r}) не зависе од положаја (вектора) \vec{r} . Да би уградили трансляторну инваријантност система при

разматрању овог елементарног процеса , и тиме добили могућа *eigen*-стања система, уведемо стања:

$$|\vec{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{r}} e^{i\vec{k}\vec{r}} |\uparrow\uparrow\downarrow_{\vec{r}}\uparrow\uparrow \dots\rangle ,$$

где $\vec{k} = (n_x \frac{2\pi}{N_x a}, n_y \frac{2\pi}{N_y a}, n_z \frac{2\pi}{N_z a})$, a је растојање међу чворовима, странице система су $L_x = N_x a$, $L_y = N_y a$, и $L_z = N_z a$, и можемо узети $n_\alpha = -\frac{N_\alpha}{2}, -\frac{N_\alpha}{2} + 1, \dots, \frac{N_\alpha}{2} - 1, \frac{N_\alpha}{2}$; $\alpha = x, y, z$. Стања $|\vec{k}\rangle$ су *eigen*-стања translације на решетци:

$$T_{\vec{R}}|\vec{k}\rangle = e^{-i\vec{k}\vec{R}}|\vec{k}\rangle \text{ где } T_{\vec{R}}|\vec{r}\rangle = T_{\vec{R}}|\vec{r} + \vec{R}\rangle.$$

Следи да

$$\hat{H}_H|\vec{k}\rangle = \left(E_0 + Z \frac{J}{2}\right)|\vec{k}\rangle - \frac{J}{2} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{s}_r} e^{-i\vec{k}\vec{s}_r} \sum_{\vec{r}} e^{i\vec{k}(\vec{r}+\vec{s}_r)} |\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow_{\vec{s}_r}\uparrow\uparrow \dots\rangle ,$$

и ако уведемо смену променљивих: $\vec{r}' = \vec{r} + \vec{s}_r$ (уз претпоставку периодичности) добијамо

$$\hat{H}_H|\vec{k}\rangle = \left[E_0 + Z \frac{J}{2} \left(1 - \frac{\sum_{\vec{s}_r} e^{-i\vec{k}\vec{s}_r}}{z} \right) \right] |\vec{k}\rangle = \epsilon(|\vec{k}|)|\vec{k}\rangle.$$

Добили смо елементарну ексцитацију – спински талас која је *eigen*-стање Хамилтонијана, енергије $\epsilon(|\vec{k}|)$. У дуготаласном лимиту дисперзија спинских таласа у овом квантном феромагнету је облика $\epsilon(|\vec{k}|) \sim |\vec{k}|^2$. Голдстонове моде су најчешће линеарне дисперзије, а случај феромагнетног уређења је посебан јер у том случају параметар уређења, $\frac{\sum_i \vec{S}_i}{N}$, комутира са Хамилтонијаном (\hat{H}_H).

Претпоставили смо интеракције кратког домета, за интеракције дугог домета Голдстонова мода може да има енергетски процеп (“*gap*”).

Спински таласи описују ексцитације које можемо посматрати и као честице тзв. магноне. Спински талас можемо да опишемо преко спинских оператора: $S_- = S_x - i S_y$,

$$|\vec{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{r}} e^{i\vec{k}\vec{r}} S_-(\vec{r})|\uparrow\uparrow\uparrow \dots\rangle ,$$

и да дефинишемо $S_-(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{r}} e^{i\vec{k}\vec{r}} S_-(\vec{r})$. Да ли оператори $S_-(\vec{k})$ и њему адјунгован $S_+(\vec{k})$ могу да представљају креационе и анихилационе операторе за магнонске ексцитације? Из комутационе релације,

$$[S_+(\vec{k}), S_-(\vec{k})] = 2 \frac{\sum_{\vec{r}} S_z(\vec{r})}{N},$$

можемо да закључимо да ексцитације феромагнетног система, магнони се понашају као идеалан Бозе гас (са $\mu = 0$) на довољно ниским температурама (уређеног система) када вредност $S_z(\vec{r})$ не флукутира много и густина магнона је мала. Тада, за $\hbar = 1$ и $S = \frac{1}{2}$ можемо предвидети да

$$\langle \vec{S}(\vec{r}) \rangle \cdot \vec{n} = S - \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}}, \text{ где } n_{\vec{k}} = \frac{1}{e^{\beta \epsilon(\vec{k})} - 1}.$$

У зависности од димензије d , $\Delta S = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}}$ се понаша на следећи начин: за $d = 3$, $\Delta S \sim T^{3/2}$, а за $d = 1, 2$; ΔS дивергира. То може довести до закључка да уређење није могуће у $d = 1$ и $d = 2$ на коначним температурама. Прецизан исказ је *Mermin-Wagner* теорема: За квантни Хајзенбергов модел са краткодметним интеракцијама не постоји спонтано нарушење симетрије на коначним температурама у једној и две димензије. Теорема се уопштава на све сличне системе (са краткодметним интеракцијама) и континуалним симетријама. Она важи и у случају суперфлуидних и суперпроводних система и у тим случајевима одговарајућа континуална симетрија је $U(1)$.

Орбитални удео у магнетизму:

За електрон наелектрисања $q = -e$, користећи Хамилтонијан који описује кретање једне честице (без спина) у магнетном пољу (векторском потенцијалу \vec{A}):

$$\hat{H} = \frac{(\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A})^2}{2m} = \frac{\vec{\pi}^2}{2m},$$

и користећи дефиницију оператора магнетизације: $\vec{M} = -\frac{\partial \hat{H}}{\partial \vec{B}}$ (у одређеном *gauge*-у), добијамо (*gauge*-инваријантну величину)

$$\vec{M} = (-e) \frac{1}{2mc} \vec{r} \times \left(\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right) = \frac{-e}{2mc} \vec{L}.$$

(Комбинација $\vec{\pi} = \vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}$ описује *gauge*-инваријантни „механички импулс“.)

Све релације које смо навели важе и у класичном опису.

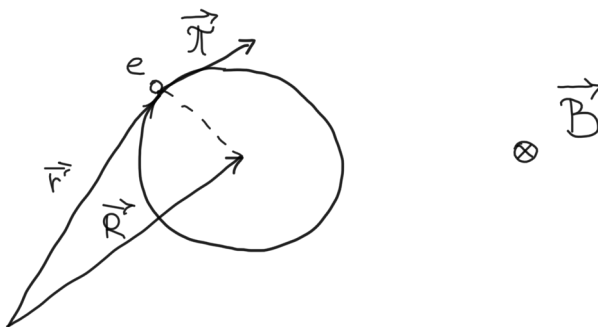
Класично можемо израчунати очекивану магнетизацију система честица користећи канонску расподелу:

$$\langle \vec{M} \rangle \sim \int d\vec{r}_1 \cdots \int d\vec{r}_N \int d\vec{p}_1 \cdots \int d\vec{p}_N \sum_i \vec{M}_i e^{-\beta \sum_i H_i(\vec{p}_i + \frac{e}{c} \vec{A})} = 0.$$

Добијамо неочекиван али тачан резултат јер \vec{M}_i је непарна функција $\vec{p}_i + \frac{e}{c} \vec{A}$.

Дакле класично, што је и тврђење *Bohr-van Leeuwen* теореме, не очекујемо магнетизам. Потребна је КМ да би се објаснила појава магнетизма!

Разматрајмо познати проблем једног електрона у две димензије у магнетном пољу нормално на раван.



4.12

При датом избору смера магнетног поља, $\vec{B} = -B\hat{z}$, важи:

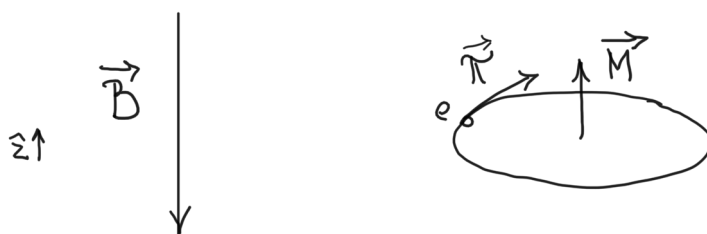
$$\vec{r} \times \vec{\pi} = \left(\vec{R} + \frac{l_B^2}{\hbar} \hat{z} \times \vec{\pi} \right) \times \vec{\pi},$$

где $l_B = \sqrt{\frac{c\hbar}{eB}}$ – магнетна дужина. Користећи бозонске алгебре оператора $\vec{\pi}$ и \vec{R} , $[\pi_x, \pi_y] = \frac{\hbar^2}{l_B^2}$, $[R_x, R_y] = -l_B^2$, можемо наћи очекивану вредост оператора ангуларног момента, $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{\pi}$, у једном Ландау нивоу $n = 0, 1, 2 \dots$:

$$\langle \vec{L} \rangle_{LL} = \langle \vec{r} \times \vec{\pi} \rangle_{LL} = - \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \hat{z}.$$

Дакле

$$\langle \vec{M} \rangle_{LL} = \frac{-e}{2 m c} \langle \vec{L} \rangle_{LL} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \mu_B \hat{z}.$$



4.13

Добијамо дијамагнетни (супротног смера) одговор на утицај \vec{B} .

Ландау је дошао до закључка да ако узмемо у обзир квантизацију (1) орбиталног кретања у равни ортогоналној на правац магнетног поља и квантизацију (2) дозвољених стања у простору (дегенерисаност Ландау нивоа) (тврдње које се везују за бозонске алгебре оператора, $\vec{\pi}$ и \vec{R}), можемо објаснити појаву тзв. Ландау дијамагнетизма у електронском гасу, тј. магнетизма усред орбиталног кретања честица. (Појава се не везује искључиво за Ферми-Дирак статистику тј. електроне на ниским температурама.) Најчешће се наводи и показује на ниским температурама и slabим пољима. Међутим спински удео је већи и доводи до парамагнетног (у смеру магнетног поља) одзива електронског гаса.

5. Суперфлуидност

(A) Разређени Бозе гас

Уводне напомене: Системе у којима постоји БАК карактерише спонтано нарушење $U(1)$ симетрије, симетрије везане за одржање броја честица. Како се описује (реализује) симетрија? Користимо оператор $e^{i\alpha\hat{N}}$ где улогу генератора има \hat{N} - оператор укупног броја честица. Деловање оператора (унитарном трансформацијом) на произвољни анихилациони оператор је:

$$e^{i\alpha\hat{N}} \hat{a} e^{-i\alpha\hat{N}} = e^{-i\alpha} \hat{a}.$$

Разматрајмо очекивану вредност у основном стању $|\tilde{\Psi}_0\rangle$ (*eigen* - стању \hat{N} тј. $\hat{N}|\tilde{\Psi}_0\rangle = N|\tilde{\Psi}_0\rangle$.) Следи

$$\langle\tilde{\Psi}_0|\hat{a}|\tilde{\Psi}_0\rangle = e^{-i\alpha} \langle\tilde{\Psi}_0|\hat{a}|\tilde{\Psi}_0\rangle,$$

$$\text{тј. } \langle\tilde{\Psi}_0|\hat{a}|\tilde{\Psi}_0\rangle = 0.$$

Са друге стране у бесконачном систему можемо имати за основно, *eigen*-стање Хамилтонијана тзв. кохерентно стање:

$$\hat{a}|\Psi_0\rangle = a|\Psi_0\rangle,$$

суперпозицију разних N_a . Дакле у бесконачном систему могуће је и да је симетрија нарушена (сломљена):

$$\langle\Psi_0|\hat{a}|\Psi_0\rangle \neq 0.$$

У базису импулса и у трансляторно инваријантном систему:

$$\hat{\Psi}(\vec{x}) = \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\vec{x}} \hat{a}_{\vec{k}},$$

$$\langle\Psi_0|\hat{\Psi}(\vec{x})|\Psi_0\rangle = \langle\Psi_0|\frac{\hat{a}_0}{\sqrt{V}}|\Psi_0\rangle \neq 0.$$

У горњој једначини користили смо закон одржања импулса. Дакле

$$\hat{a}_0|\Psi_0\rangle = a_0|\Psi_0\rangle, \text{ и } |\Psi_0\rangle \text{ је суперпозиција разних (и макроскопских) } N_0.$$

Како се описује – шта је $|\Psi_0\rangle$ и какве су ексцитације изнад?

Често „пројектујемо“ – трансформишемо \hat{H} у \hat{H}_{ssb} који је адаптиран на „правац“ нарушене симетрије. У \hat{H}_{ssb} је симетрија нарушена док само \hat{H} – Хамилтонијан система поштује симетрију. Конкретно

$$\hat{H} \rightarrow \hat{H}_{ssb} - \mu \hat{N},$$

тј. у опису нарушеног очувања броја честица – неодређености броја честица, средњи број честица фиксирамо преко хемијског потенцијала, μ . (Није неопходно али рачун може бити једноставнији.)

Како налазимо \hat{H}_{ssb} ?

Користимо опис нарушења симетрије (у случају БАК-а, $\hat{a}_0 |\Psi_0\rangle = a_0 |\Psi_0\rangle$, где је a_0 фиксиран комплексни број) и у слабо интерагујућим системима, кад очекујемо да су квантне флукуације неких величина мале, замењујемо за такву величину њен оператор \hat{O} (у случају БАК-а, \hat{a}_0) функцијом (бројем) $O(a_0)$ на целом простору ($|\Psi\rangle$ - разно) система.

Разређени Бозе гас – Богољубовљево решење

Разређени Бозе гас као и разређени Ферми гас можемо дефинисати преко a (дужине расејања) тако да је задовољено:

$$a \ll \left(\frac{V}{N}\right)^{1/3}.$$

Ова релација важи у модерним експериментима са хладним атомима у стању БАК. Проблему можемо прићи на следећи начин (Ландау, Лифшиц): на ниским температурама својствене вредности оператора $\hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0$, N_0 су веома велике, $N_0 \gg 1$. Због тога у комутационој релацији $\hat{a}_0 \hat{a}_0^\dagger = \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 + 1$ можемо занемарити број 1 и тиме \hat{a}_0 постаје комплексан број $\hat{a}_0 \rightarrow a_0 = \sqrt{N_0} e^{-i\varphi}$, где φ је фиксирано. На основу наших претходних напомена можемо рећи и да развијамо Хамилтонијан око кохерентног стања,

$$\hat{a}_0 |\Psi_0\rangle = \sqrt{N_0} e^{-i\varphi} |\Psi_0\rangle,$$

тако да узимамо да $\hat{a}_0 \rightarrow a_0 = \sqrt{N_0} e^{-i\varphi}$ и $\hat{a}_0^\dagger \rightarrow a_0^* = \sqrt{N_0} e^{i\varphi}$ ($\hat{a}_0 |\Psi\rangle = \sqrt{N_0} e^{-i\varphi} |\Psi\rangle$, где $|\Psi\rangle$ је произвољно).

Почетни Хамилтонијан је

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \frac{\lambda}{2V} \sum_{\vec{k}_1 + \vec{k}_2 = \vec{k}_3 + \vec{k}_4} a_{\vec{k}_1}^\dagger a_{\vec{k}_2}^\dagger a_{\vec{k}_3} a_{\vec{k}_4}.$$

Ако користимо $\hat{a}_0 \rightarrow \sqrt{N_0}$ и $\hat{a}_0^\dagger \rightarrow \sqrt{N_0}$, где је узето $\varphi = 0$, опис система је дат преко

$$\begin{aligned} \hat{\Omega}_{ssb} &= \hat{H}_{ssb} - \mu \hat{N} = \frac{\lambda N_0^2}{2V} - \mu N_0 + \sum_{\vec{k} \neq 0} \left(\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} - \mu \right) a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} \\ &+ \frac{\lambda}{2V} [4N_0 \sum_{\vec{k} \neq 0} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + N_0 \sum_{\vec{k} \neq 0} (a_{\vec{k}}^\dagger a_{-\vec{k}}^\dagger + a_{-\vec{k}} a_{\vec{k}})] + \dots \end{aligned}$$

(У развоју нема чланова $\sim N_0 \sqrt{N_0}$ јер одржање импулса забрањује.)

Дефинишимо $\Omega_0 = \frac{\lambda N_0^2}{2V} - \mu N_0$. У првој апроксимацији, из услова термодинамичке равнотеже за унутрашњи параметар N_0 , $\frac{\partial \Omega_0}{\partial N_0} = 0$, следи $\mu = \lambda \frac{N_0}{V}$.

Због великог N_0 можемо да разматрамо редукован проблем :

$$\begin{aligned} \hat{\Omega} - \Omega_0 &= \sum_{\vec{k} \neq 0} (\epsilon(\vec{k}) + \mu) a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \frac{\mu}{2} \sum_{\vec{k} \neq 0} (a_{\vec{k}}^\dagger a_{-\vec{k}}^\dagger + a_{-\vec{k}} a_{\vec{k}}); \\ \epsilon(\vec{k}) &= \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}. \end{aligned}$$

Уведимо канонску трансформацију:

$$a_{\vec{k}}, a_{\vec{k}}^\dagger \rightarrow b_{\vec{k}}, b_{\vec{k}}^\dagger \quad \text{тако да важи: } [b_{\vec{k}}, b_{\vec{k}}^\dagger] = 1.$$

Експлицитно

$$a_{\vec{k}} = b_{\vec{k}} \cosh \vartheta_{\vec{k}} + b_{-\vec{k}}^\dagger \sinh \vartheta_{\vec{k}}, \quad \vartheta_{\vec{k}} = \vartheta_{-\vec{k}},$$

тј.
$$\begin{bmatrix} a_{\vec{k}} \\ a_{-\vec{k}}^\dagger \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cosh \vartheta_{\vec{k}} & \sinh \vartheta_{\vec{k}} \\ \sinh \vartheta_{\vec{k}} & \cosh \vartheta_{\vec{k}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_{\vec{k}} \\ b_{-\vec{k}}^\dagger \end{bmatrix}.$$

Када заменимо изразе за $a_{\vec{k}}$ преко $b_{\vec{k}}$ у $\hat{\Omega} - \Omega_0$, нетривијалан операторски део биће облика:

$$\delta \hat{\Omega} = \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}} b^\dagger b + \sum_{\vec{k}} g_{\vec{k}} (b^\dagger b^\dagger + b b).$$

Ако захтевамо да $g_{\vec{k}} = 0$ (да би дијагонализовали проблем) добијамо једнакост коју $\vartheta_{\vec{k}}$ („угао ротације“) мора да задовољава:

$$\tanh 2\vartheta_{\vec{k}} = -\frac{\mu}{\epsilon(\vec{k}) + \mu}.$$

Следи да $\delta\hat{\Omega} = \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^{\dagger} b_{\vec{k}}$ где $E_{\vec{k}} = \sqrt{(\epsilon(\vec{k}) + \mu)^2 - \mu^2}$. Тиме смо дијагонализовали проблем – опис смо дали у виду ексцитација идеалног система (без интеракције међу ексцитацијама). У дуготаласном лимесу, кад $|\vec{k}| \rightarrow 0$, и ако уведемо ознаку за густину честица у кондензату, $\rho_0 = \frac{N_0}{V}$, следи

$$E_{\vec{k}} \approx \sqrt{\frac{\lambda}{m} \rho_0} |\vec{k}|.$$

Важно је да уочимо:

- (1) Када јачина интеракције слаби, $\lambda \rightarrow 0$, $b_{\vec{k}} \rightarrow a_{\vec{k}}$ и ексцитације су ближе једночестичним, али и тада када $|\vec{k}| \rightarrow 0$, $E_{\vec{k}} \sim |\vec{k}|$, за коначно λ . $E_{\vec{k}}$ описује Голдстонову моду тзв. фононске ексцитације.
- (2) За λ јаче ексцитације су ближе таласима густине тј. ексцитације представљају звучне таласе. За λ јаче $b_{\vec{q}}^{\dagger} \sim \rho_{\vec{q}} = \sqrt{N_0} (a_{\vec{q}}^{\dagger} + a_{-\vec{q}})$ где смо употребили Богољубов развој за оператор густине $\rho_{\vec{q}} = \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}+\vec{q}}^{\dagger} a_{\vec{k}}$.

- (3) Фонони нису *eigen*-стања броја честица:

$$b_{\vec{k}} = a_{\vec{k}} \cosh 2\vartheta_{\vec{k}} - a_{-\vec{k}}^{\dagger} \sinh 2\vartheta_{\vec{k}},$$

повезујемо их и са анихилацијом и креацијом основних честица. То су колективне ексцитације, које могу размењивати број честица са (осталим) системом.

- (4) За велико $|\vec{k}|$, у краткоталасном лимесу, $E_{\vec{k}} \approx \epsilon(\vec{k})$ и ексцитације су једночестичне. Иначе $E_{\vec{k}}$ је монотono растућа функција од $|\vec{k}|$.

Богољубовљево решење нам омогућава да нађемо основно стање система које мора да представља вакуум за фононе:

$$b_{\vec{k}} |\Psi_0\rangle = 0, \quad \forall \vec{k}.$$

Број честица изнад кондензата на $T = 0$, $N_{exc} = \sum_{\vec{k} \neq 0} \langle \Psi_0 | a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} | \Psi_0 \rangle \neq 0$,

Интеракције смањују број честица у кондензату.

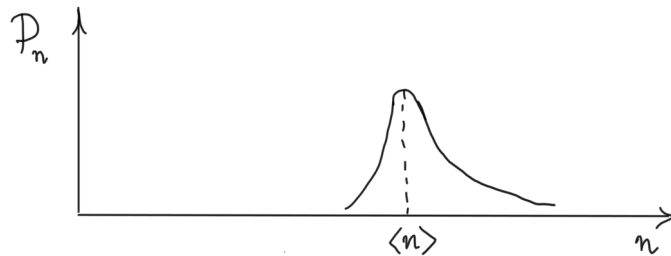
(Б) Спонтано нарушење симетрије

Размотримо улогу $U(1)$ симетрије у опису система у којем постоји БАК. Следи математички интермецо (*Stone* књига) који се тиче вештачког система у коме постоји ϵ_0 – само један енергетски ниво у коначној запремини V са степеном слободе попуњености где $a_0^\dagger a_0$ може попримати (*eigen*-)вредности: $0, 1, 2, \dots, \infty$ (степен слободе може имати бесконачну вредност). Разматрајмо тзв. кохерентна стања:

$$|\Phi\rangle = e^{\sqrt{V}\Phi a_0^\dagger - \sqrt{V}\Phi^* a_0} |0\rangle = e^{-\frac{V|\Phi|^2}{2}} e^{\sqrt{V}\Phi a_0^\dagger} |0\rangle,$$

и стања попуњености n : $a_0^\dagger a_0 |n\rangle = n |n\rangle$. Кохерентно стање је везано за (*Poisson*-ову) расподелу,

$$P_n = |\langle n | \Phi \rangle|^2 = e^{-V|\Phi|^2} \frac{V^n |\Phi|^{2n}}{n!},$$



5.1

а средња попуњеност је $\langle n \rangle = \langle \Phi | a_0^\dagger a_0 | \Phi \rangle = V |\Phi|^2$. Следе три важна својства:

- (1) $\hat{a}_0 |\Phi\rangle = \sqrt{V} \Phi |\Phi\rangle$.
- (2) Ако дефинишемо $\hat{U}(\alpha) = e^{i\alpha \hat{N}}$ и (у овом систему) $\hat{N} = a_0^\dagger a_0$ следи

$$\hat{U}(\alpha) |\Phi\rangle = |\Phi e^{i\alpha}\rangle.$$
- (3) $|\langle \Phi' | \Phi \rangle| = e^{-\frac{1}{2}V|\Phi - \Phi'|^2}$.

Можемо закључити да су кохерентна стања дефинисана преко различитих параметара Φ ортогонална у лимесу велике запремине, $V \rightarrow \infty$.

Разматрајмо систем честица у коначној запремини V и са Хамилтонијаном, $\hat{H} = \hat{K} + \hat{V}$ и $[\hat{H}, \hat{N}] = 0$. Дефинишимо стања облика

$$|\Phi\rangle_{\hat{V}} = e^{-\frac{V|\Phi|^2}{2}} e^{\sqrt{V}\Phi a_0^\dagger} |\{\vec{p} \neq 0\}\rangle,$$

где $|\{\vec{p} \neq 0\}\rangle$ описује присуство честица са импулсом $\vec{p} \neq 0$ у самом стању. И даље важе својства (1) и (2). Својство (3) се модификује у

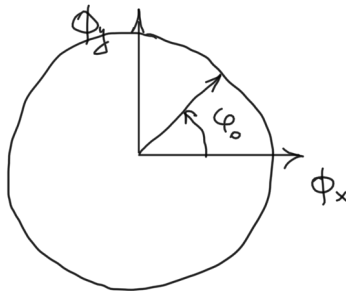
$$|\langle \Phi' |_{\hat{V}} | \Phi \rangle_{\hat{V}}| = e^{-\frac{1}{2}V|\Phi - \Phi'|^2} \langle \{\vec{p}' \neq 0\} | \{\vec{p} \neq 0\} \rangle$$

али и даље стања са различитим Φ су ортогонална у лимесу $V \rightarrow \infty$.

Спонтано нарушење симетрије описујемо као појаву да у термодинамичком лимесу, када $V, N \rightarrow \infty$, $|\Phi\rangle_{\hat{V}}$ постаје *eigen*-стање \hat{H} , иако нарушава симетрију- није *eigen*-стање \hat{N} . Важи

$$\hat{a}_0 |\Phi\rangle_{\hat{V}} = \sqrt{V}\Phi |\Phi\rangle_{\hat{V}},$$

$$\langle \Phi |_{\hat{V}} \Psi(\vec{x}) | \Phi \rangle_{\hat{V}} = \langle \Phi |_{\hat{V}} \frac{a_0}{\sqrt{V}} | \Phi \rangle_{\hat{V}} = \Phi = \sqrt{n_0} e^{i\varphi_0}.$$



Три важна својства су да постоји

- (1) изабран, фиксиран правац који нарушава симетрију и да у трансляторно инваријантном систему $\langle \Phi |_{\hat{V}} \Psi(\vec{x}) | \Phi \rangle_{\hat{V}} = \sqrt{n_0} e^{i\varphi_0} \equiv \Phi_0$.
- (2) $[\hat{H}, \hat{U}(\alpha)] = 0$. Ако је $|\Phi = \Phi_0\rangle_{\hat{V}}$ *eigen*-стање и свако друго (заротирано) $|\Phi = \Phi_0 e^{i\alpha}\rangle_{\hat{V}}$ је *eigen*-стање.
- (3) $\langle \Phi |_{\hat{V}} | \Phi' \rangle_{\hat{V}} = 0$ ако $\Phi \neq \Phi'$ ($\varphi \neq \varphi'$) у систему $V, N \rightarrow \infty$.

Као у феромагнетима очекујемо постојање параметра уређења (слично магнетизацији у феромагнетима) тј. функције од (\vec{r}, t) која карактерише уређење:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sqrt{n(\vec{r}, t)} e^{i\varphi(\vec{r}, t)}.$$

То је и „макроскопска таласна функција“ или „таласна функција кондензата“.

Зависност од \vec{r}, t може доћи од облика замке у БАК експерименту, од разних проба које ексцитују систем...

Како можемо наћи и описати $\Psi(\vec{r}, t)$ у режиму разређеног гаса? Одговор даје Грос-Питаевски једначина, коју разматрамо у следећем одељку.

(В) Грос-Питаевски једначина

Хамилтонијан система у другој квантизацији је

$$\hat{H} = \int d\vec{r} \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \right) \hat{\Psi}(\vec{r}) + \frac{1}{2} \int d\vec{r} \int d\vec{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}') V(|\vec{r} - \vec{r}'|) \hat{\Psi}(\vec{r}') \hat{\Psi}(\vec{r}) \\ + \int d\vec{r} \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) V_{ext}(\vec{r}) \hat{\Psi}(\vec{r}).$$

Пређимо у Хајзенбергову слику:

$$\hat{\Psi}(\vec{r}) \rightarrow \hat{\Psi}_H(\vec{r}, t) = e^{i\frac{\hat{H}t}{\hbar}} \hat{\Psi}(\vec{r}) e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}}. \\ i\hbar \frac{\partial \hat{\Psi}_H(\vec{r}, t)}{\partial t} = [\hat{\Psi}_H(\vec{r}, t), \hat{H}] = \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(\vec{r}) \right] \hat{\Psi}_H(\vec{r}, t) \\ + \int d\vec{r}' \hat{\Psi}_H^\dagger(\vec{r}', t) V(|\vec{r} - \vec{r}'|) \hat{\Psi}_H(\vec{r}', t) \hat{\Psi}_H(\vec{r}, t).$$

- (1) Слично разматрању Богољубова, применићемо прилаз средњег поља и оператор $\hat{\Psi}_H(\vec{r}, t)$ апроксимирати обичном функцијом $\Psi_H(\vec{r}, t)$:

$$\hat{\Psi}_H(\vec{r}, t) = \Psi_H(\vec{r}, t) + \underbrace{\delta\hat{\Psi}_H(\vec{r}, t)}_{\text{део који одбацујемо}} .$$
 Функција $\Psi_H(\vec{r}, t) = \sqrt{n_0}$ у основном стању у униформном систему.
- (2) Размотрићемо случај контактне интеракције, $V(|\vec{r} - \vec{r}'|) = \lambda \delta(\vec{r} - \vec{r}')$.
 У случају разређеног Бозе гаса $\lambda = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}$.

Из претпоставки (1) и (2) следи Грос-Питаевски једначина:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(\vec{r}) + \lambda |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \right) \Psi(\vec{r}, t).$$

У случају униформног система $V_{ext}(\vec{r}) = 0$ и решење можемо тражити у облику $\Psi(\vec{r}, t) = \Phi(\vec{r}, t) e^{-i\frac{\mu}{\hbar}t}$, где је $\mu = \rho_0 \lambda$ (водећа вредност у решењу Богољубова). Следи

$$i\hbar \frac{\partial \Phi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \lambda (|\Phi(\vec{r}, t)|^2 - \rho_0) \right) \Phi(\vec{r}, t).$$

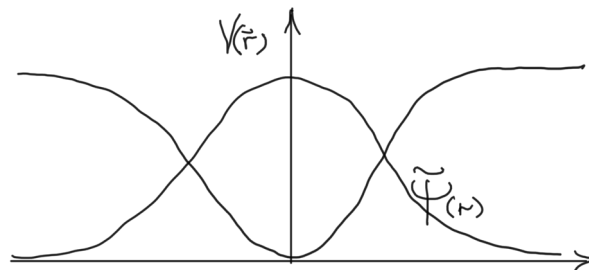
Ако смо заинтересовани за опис фононских мода решење тражимо у облику:

$$\Phi(\vec{r}, t) = \sqrt{n_0} + \eta(\vec{r}, t),$$

где $\eta(\vec{r}, t)$ представља мали отклон у односу на конфигурацију $\Phi_0 = \sqrt{n_0}$ ($\varphi = 0$) у основном стању.

У БАК режиму разређеног Бозе гаса у коначној замци у којој се систем налази пре свега тражимо стационарна решења, односно опис основног стања. Због $N_0 \approx N$, можемо очекивати

$\Psi_0(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \prod_{i=1}^N \tilde{\Psi}(\vec{r}_i)$ тј. основно стање у облику једноставне перманенте – исто $\tilde{\Psi}(\vec{r})$ за сваку честицу:



Слично ХФ методу за фермионе можемо тражити стационарно решење функционала:

$$\mathcal{F}(\Psi_0^*, \Psi_0) = \langle \Psi_0 | \hat{H} | \Psi_0 \rangle - \mu (\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle - 1),$$

и добити одговарајућу једначину за $\tilde{\Psi}$:

$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(\vec{r}) + N\lambda |\tilde{\Psi}(\vec{r})|^2 \right) \tilde{\Psi}(\vec{r}) = \mu \tilde{\Psi}(\vec{r}).$$

Ако $\sqrt{N} \tilde{\Psi}(\vec{r}) \rightarrow \Phi(\vec{r})$ једначина је временски независна Грос-Питаевски једначина добијена када тражимо решење у облику $\Psi(\vec{r}, t) = \Phi(\vec{r}) e^{-i\frac{\mu}{\hbar}t}$. Аналогно ХФ методи у фермионским системима, када је Лагранжов умножак \mathcal{E}_j – енергија задње орбитале једнака „енергији јонизације“ овде μ има значење хемијског потенцијала.

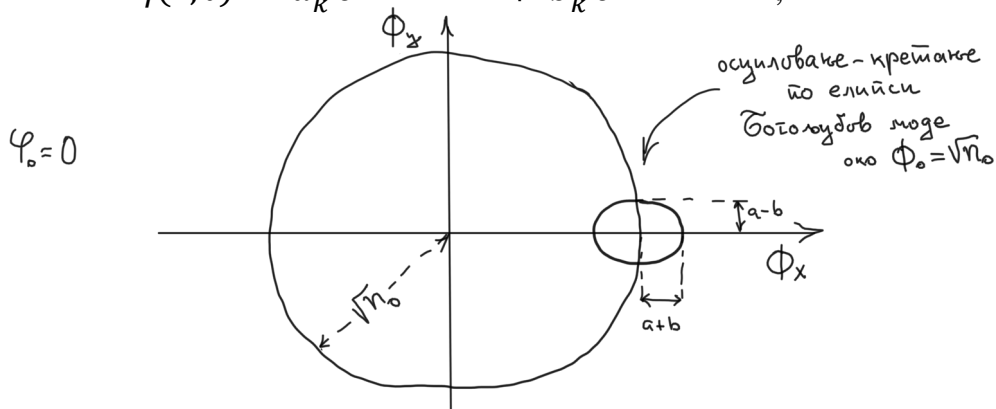
Вратимо се на опис који укључује временску зависност и потражимо решења Грос-Питаевски једначине која описују ексцитације изнад кондензата: $\Phi(\vec{r}, t) = \sqrt{n_0} + \eta(\vec{r}, t)$, где је $\eta(\vec{r}, t)$ мали отклон у односу на основну конфигурацију. Ако линеаризујемо Грос-Питаевски једначину по $\eta(\vec{r}, t)$ добијамо:

$$i\hbar \frac{\partial \eta(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \eta + \lambda n_0 (\eta + \eta^*),$$

$$-i\hbar \frac{\partial \eta^*(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \eta^* + \lambda n_0 (\eta + \eta^*).$$

Тражимо решење у облику

$$\eta(\vec{r}, t) = a_{\vec{k}} e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega_k t)} + b_{\vec{k}} e^{-i(\vec{k}\vec{r} - \omega_k t)},$$



и решавамо својствени проблем. За својствене вредности добијамо $\omega_{\vec{k}} = E_{\vec{k}} = \sqrt{(\epsilon(\vec{k}) + \mu)^2 - \mu^2}$ - Богољубов моду, што је у сагласности са претходним описом у (сличној) Богољубов апроксимацији. Што се тиче амплитуде таласа, у истој апроксимацији, амплитуде описују девијацију броја честица и фазе кондензата:

$$\Phi(\vec{r}, t) = \sqrt{n_0} + \underbrace{\sum_{\vec{k}} (a_{\vec{k}} + b_{\vec{k}})}_{\sim \delta n} \cos(\vec{k}\vec{r} - \omega_{\vec{k}}t) + i \underbrace{\sum_{\vec{k}} (a_{\vec{k}} - b_{\vec{k}})}_{\sim \delta \varphi} \sin(\vec{k}\vec{r} - \omega_{\vec{k}}t).$$

Ове девијације се понашају као S_x и S_y у спинском таласу око z осе тј. представљају локалне коњуговане варијабле (коњуговане варијабле као x и p у опису једне честице). Помоћу овог описа можемо идентификовати коњуговане варијабле за читав кондензат (у униформном систему): N_0 - број честица и φ - фаза кондензата. У нашем опису спонтаног нарушења симетрије изабрали смо φ репрезентацију – стања одређене фазе уз неодређеност N_0 тј. N . Могуће је користити и N репрезентацију тј. систем са одређеним бројем честица N а неодређеним φ .

(Г) Фонони

Разматрајмо Голдстонове моде – фононе у „густим“ Бозе системима као што је Helium-4 у суперфлуидној фази, тј. важи $\rho_{He} \gg \rho_{BEC}$. Систем Helium-4 је јако интерагујући систем и тежак за опис, али оно што ћемо показати да у нискоенергетском, дуготаласном домену, уз помоћ квантизовања класичних осцилација густине можемо доћи до универзалног описа карактеристичног за Голдстонову моду. И не само то, како је *Feynman* показао, можемо доћи до квалитативног описа целог спектра квазичестичних ексцитација суперфлуидног Helium-4.

Густ систем нам омогућава да у оквирима класичног разматрања, на довољно дугим просторним и временским скалама, дамо опис на начин континуума са локалним, густином $\rho(\vec{r}, t)$ и брзином $\vec{v}(\vec{r}, t)$. То је тзв. хидродинамички прилаз. На тај начин, класично, можемо разматрати ексцитације густине у инверзном простору:

$$\rho(\vec{r}, t) = \rho_0 + \sum_{\vec{k} \neq 0} \rho_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}},$$

где $\rho_{\vec{k}}(t)$ представљају елементарне моде – отклоне од униформне конфигурације. Претпоставимо хармонијско осциловање:

$$\ddot{\rho}_{\vec{k}}(t) = -\omega_{\vec{k}}^2 \rho_{\vec{k}}(t), \text{ тј. } \rho_{\vec{k}}(t) = \rho_{\vec{k}} e^{-i\omega_{\vec{k}}t}.$$

Интеракције међу честицама су те које враћају густину у њену униформну вредност. Хармонијске осцилације можемо лако квантизовати. У том прелазу догађа се квалитативни скок у опису: долази до појаве тзв. “*zero-point motion*”- појаве неодређености импулса и одговарајуће кинетичке енергије – кретања чак на $T = 0$.

У једночестичном хармонијском проблему: $\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$ и таласна функција основног стања је $\Psi_0^{h.o.} \sim e^{-\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)x^2}$ са коначном (ненултом) енергијом. Аналогно, за наш систем очекујемо да улогу координате x за свако \vec{k} преузме варијабли $\rho_{\vec{k}}$ и да се удео фононских осцилација у таласној функцији основног стања може изразити као

$$\Psi_0 \sim e^{-\sum_{\vec{k}} f(|\vec{k}|) \rho(\vec{k}) \rho(-\vec{k})}.$$

У првој квантизацији густина система честица се дефинише преко суме: $\rho(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N \delta^3(\vec{r} - \vec{r}_i)$ и одговарајући израз у инверзном простору је $\rho(\vec{k}) = \sum_{i=1}^N e^{i\vec{k}\vec{r}_i}$. Следи да таласна функција основног стања може бити

$$\Psi_0 \sim e^{-\sum_{i<j} \tilde{f}(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)} \sim \prod_{i<j} \tilde{F}(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|),$$

тј. имати тзв. *Jastrow* облик. Тиме смо описали допринос основном стању од фонона. (Овај допринос постоји и у случају јако интерагујућег Ферми система, Helium-3, у коме се опис не може свести на једну *Slater* детерминанту.) Како би изгледале таласне функције ексцитованих стања? На основу аналогије са првим ексцитованим стањем хармонијског осцилатора, $\Psi_1^{h.o.} \sim x e^{-\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)x^2}$, *Feynman* је предложио следећу таласну функцију за опис ексцитација суперфлуидног Helium-4, одређеног импулса \vec{k} ,

$$\rho_{\vec{k}} \Psi_0(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N),$$

где је $\rho(\vec{k}) = \sum_{i=1}^N e^{i\vec{k}\vec{r}_i}$ и $\Psi_0(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ је таласна функција основног стања у којој поред фононског доприноса узета је у обзир сва микрофизика. Саму енергију екситације за одређено \vec{k} можемо изразити преко очекиване вредности:

$$E_{exc}(\vec{k}) = \frac{\langle \Psi_0 | \rho(-\vec{k})(\hat{H} - E_0)\rho(\vec{k}) | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \rho(-\vec{k})\rho(\vec{k}) | \Psi_0 \rangle} = \frac{f(\vec{k})}{Ns(\vec{k})}.$$

Да би израчунали $f(\vec{k})$ претпоставимо симетрију на просторну инверзију, $f(\vec{k}) = f(-\vec{k})$.

$$\begin{aligned} f(\vec{k}) &= \frac{\langle \Psi_0 | \rho(-\vec{k})(\hat{H} - E_0)\rho(\vec{k}) | \Psi_0 \rangle + \langle \Psi_0 | \rho(\vec{k})(\hat{H} - E_0)\rho(-\vec{k}) | \Psi_0 \rangle}{2} \\ &= \frac{\langle \Psi_0 | \rho(-\vec{k})[\hat{H}, \rho(\vec{k})] | \Psi_0 \rangle + \langle \Psi_0 | [\hat{H}, \rho(\vec{k})] \rho(-\vec{k}) | \Psi_0 \rangle}{2} \\ &= \frac{\langle \Psi_0 | [\rho(-\vec{k}), [\hat{H}, \rho(\vec{k})]] | \Psi_0 \rangle}{2} = N \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \end{aligned}$$

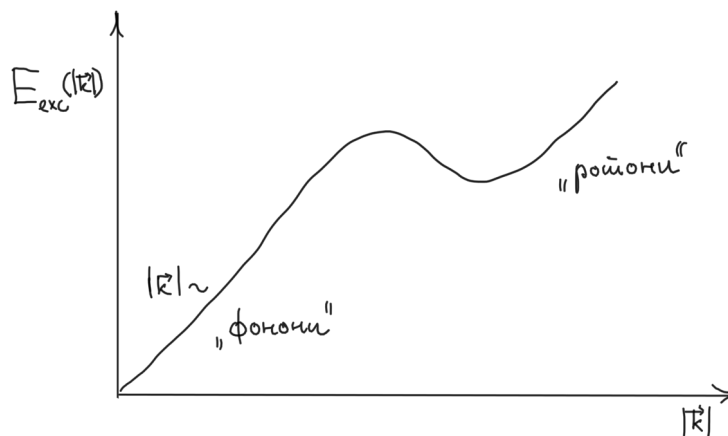
Задњи израз можемо добити у првој квантизацији, преко комутатора:

$$[\rho(-\vec{k}), [\vec{p}^2, \rho(\vec{k})]] = 2 |\vec{k}|^2 \hbar^2.$$

Дакле сама енергија екситације добија једноставан облик,

$$E_{exc}(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m s(\vec{k})}.$$

Ипак $s(\vec{k})$, фактор статичке структуре (повезан са радијалном дистрибуционом функцијом у реалном простору) морамо добити из експерименталних података, за овај јако корелисани систем, да би репродуковали ротонски део спектра – минимум у енергији екситације у зависности од $|\vec{k}|$ (који не постоји у Богољубов решењу).



5.5

За фононски део спектра можемо да користимо Богољубов прилаз у коме добијамо:

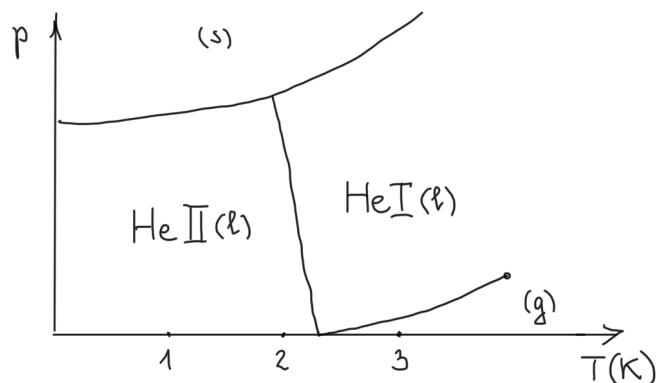
$$s(\vec{k}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}, \vec{p}} \langle \Psi_0 | a_{\vec{q}-\vec{k}}^\dagger a_{\vec{q}} a_{\vec{p}+\vec{k}}^\dagger a_{\vec{p}} | \Psi_0 \rangle \approx \frac{N_0}{N} \frac{\epsilon(\vec{k})}{E(\vec{k})}$$

где $E(\vec{k}) = \sqrt{(\epsilon(\vec{k}) + \mu)^2 - \mu^2}$, Богољубов енергија ексцитација. Дакле у случају Helium-4 када очекујемо да је N_0 доста мањи део N него у разређеном Бозе гасу, нагиб фононског спектра је много оштрији. Ипак фонони тј. Голдстонове моде карактеришу исту фазу материје: и разређени Бозе гас и Helium-4 су у суперфлуидној фази на ниским температурама.

(Д) Суперфлуидност

Суперфлуидан је проток без отпора и губитка кинетичке енергије, тј. без трења (у односу на зидове суда) али и са нула вискозности тј. без трења међу слојевима течности.

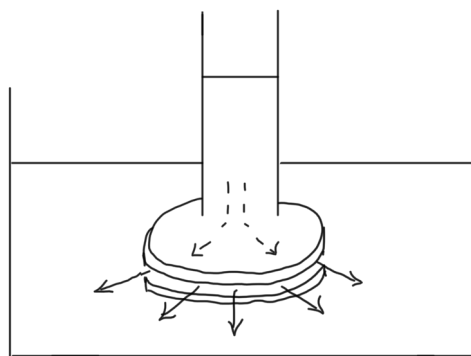
Изразит пример суперфлуидног система је систем неутралних атома Helium-4 на ниским температурама. Helium-4, због мале масе и плитког међуатомског потенцијала, се не кристалише на ниским температурама.



5.6

Означавамо са He I нормалну течност, а са He II суперфлуидну (квантну) течност. Прелаз He I \leftrightarrow He II је тзв. ламбда прелаз.

Проналазак суперфлуидности у He II се догодио у 1938. години и описаћемо укратко експеримент руског физичара Капице:

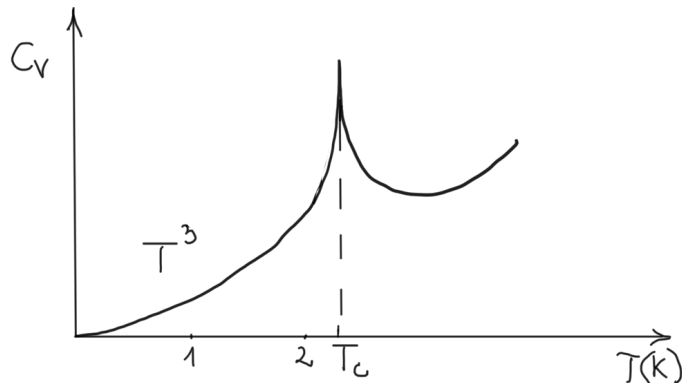


5.7

У експерименту се посматра проток He течности кроз узак пролаз између два стаклена диска тиме што се мери време (τ) изједначавања нивоа у стакленој цеви и посуди: за $T > T_c$, $\tau \sim \text{min}$ а за $T < T_c$, $\tau \sim \text{sec}$.

Даљи експерименти довели су до разумевања тзв. суперфлуидног дела течности: може се екстраполирати да на $T = 0$, $\rho_s = \rho_0 + \rho_{\vec{k} \neq 0} = \rho$ – сва течност је суперфлуид (и она ван кондензата), а на $T > 0$, $\rho = \rho_s + \rho_n$, где је ρ_n тзв. нормални део течности (са трећем) који се односи на удео термално побуђених ексцитација (фонона, ...)

Прелаз из He I у He II (суперфлуидни He) је ламбда прелаз са карактеристичним (налик слову ламбда) опису зависности специфичне топлоте од температуре:

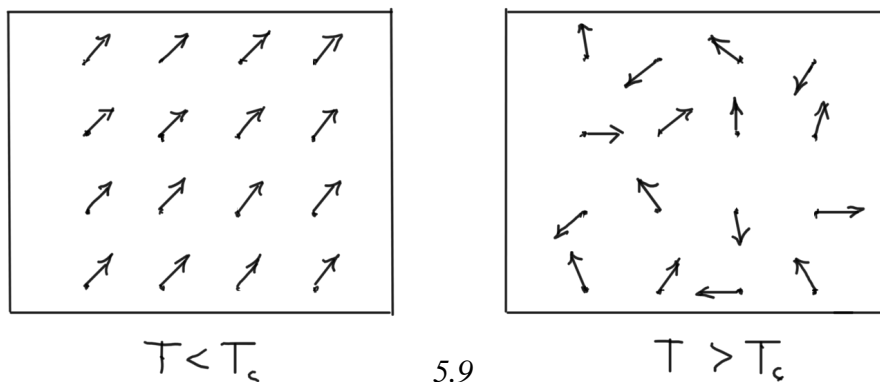


5.8

Нискотемпературну зависност, $c_V \sim T^3$ везујемо за ексцитације фонона (честице линеарне дисперзије). Што се тиче описа самог прелаза детаљним изучавањем одговарајућег модела дошло се до следећег понашања:

$$c_V = \begin{cases} c_<(T) + A_+ |T - T_c|^{-\alpha} & (T < T_c) \\ c_>(T) + A_- |T - T_c|^{-\alpha} & (T > T_c) \end{cases},$$

где $\alpha \approx -0.01$. Одговарајући модел исте класе универзалности је XY модел. То је једноставно постављен класичан модел магнета са дводимензионим, нормализованим векторима \vec{n} ($\vec{n} \cdot \vec{n} = 1$) распоређеним по кристалној решетци у три димензије. Дакле сваком чвору је придружен степен слободe угла φ , аналогно опису суперфлуида преко фазе. Уређена фаза за $T < T_c$ одговара суперфлуидној фази система Helium-4.



5.9

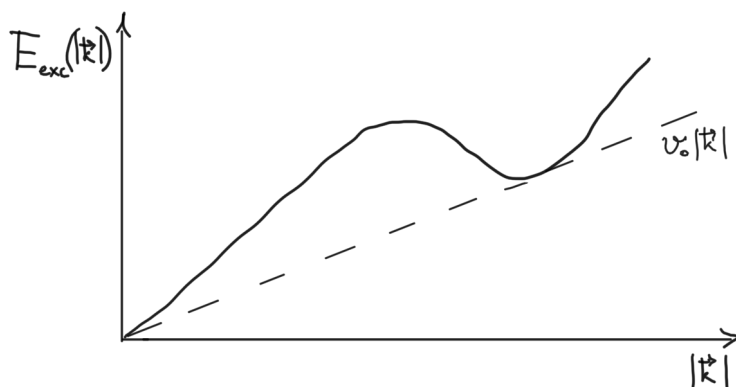
Како можемо објаснити појаву суперфлуидности?

- (1) Неопходно је постојање кондензата тј. да честице теже (да имају) и поседују исту брзину тј. да су у истом стању.

- (2) Суперфлуидност карактерише и „ригидност“: да би покренули систем треба да ексцитујемо сваку честицу (створимо колективну ексцитацију) и зато су неопходне интеракције: $V(r)$!

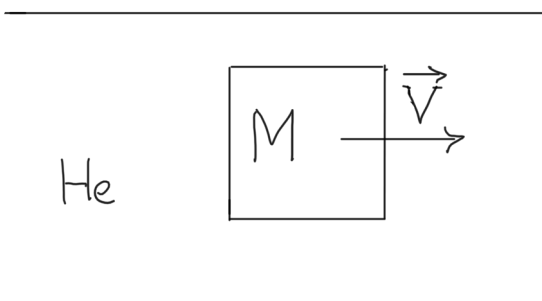
Прецизније услов (2) је дат на начин Ландау критеријума. Можемо се упитати како и поред ексцитација без енергетског процепа (“*gapless*”) немамо дисипацију? Одговор је дат преко Ландау критеријума за суперфлуидност:

Разматрајмо суперфлуидни хелијум чији спектар (квазичестичних) ексцитација је карактеристичног облика са фононски и ротонским ексцитацијама:



5.10

Посматрајмо кретање масивног тела у суперфлуидном хелијуму који мирује.



$$\delta E_k^M = \frac{(M\vec{V} + \delta\vec{k})^2}{2M} - \frac{M\vec{V}^2}{2} \approx \vec{V} \cdot \delta\vec{k}$$

5.11

Ако би дошло до трења и редукције кинетичке енергије то би било прећено стварањем ексцитација у суперфлуиду:

$$|\delta E_k^M| = \sum_{\vec{k}_i} E(\vec{k}_i) \geq v_0 \sum_i |\vec{k}_i| \geq v_0 \left| \sum_i \vec{k}_i \right| = v_0 |\delta \vec{k}|,$$

где $v_0 = \min \left\{ \frac{E(\vec{k})}{|\vec{k}|} \right\}$. Дакле $\vec{V} \cdot \delta \vec{k} \geq v_0 |\delta \vec{k}|$ тј. v_0 је критична брзина за пренос енергије. То се односи и на ситуацију када хелијум протиче а масивно тело мирује јер физички процес стварања $E(\vec{k}_i)$ је независан од угла гледања (референтног система). Можемо приметити да када је флуид у миру једноставнији је опис његових ексцитација. Оцена брзине је ипак прецењена – за мање брзине већ у додиру са површинама (суда) могу да се ексцитују вортексне ексцитације и тиме деградирају суперток. Али бар квалитативно Ландау критеријум даје објашњење услова при којима можемо очекивати суперфлуидност.

Можемо се упитати зашто на $T = 0$ цела течност је суперфлуидна (чини суперток, чак и честице изван кондензата): $\rho_s(T = 0) = \rho_0 + \rho_{\vec{k} \neq 0} = \rho$.

(У *Feynman* конструкцији $\rho_{\vec{k}}$ $\Psi_0(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ дали смо импулс једној честици али је била неопходна симетризација преко $\rho(\vec{k}) = \sum_{i=1}^N e^{i\vec{k}\vec{r}_i}$, и тако смо описали колективну ексцитацију у систему са интеракцијама.) Овде разматрамо ситуацију са током целог система када је дат импулс (брзина) честицама али и даље морамо да очувамо симетричност. Математички очигледна могућност је

$$e^{i\vec{k}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2 + \dots + \vec{r}_N)} \Psi_0(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$$

тј. да све честице учествују у супертоку.

Како описати локалну брзину суперфлуида?

Ограничимо се на разређени Бозе гас: $N_0 \sim N$, и опис на начин Грос-Питаевски једначине:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(\vec{r}) + \lambda |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \right) \Psi(\vec{r}, t), \quad \text{у којој } \Psi(\vec{r}, t) = \sqrt{\rho(\vec{r}, t)} e^{i\varphi(\vec{r}, t)}.$$

Следи да $i\hbar \frac{\partial |\Psi(\vec{r}, t)|^2}{\partial t} = \vec{\nabla} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} (\Psi^* \vec{\nabla} \Psi - (\vec{\nabla} \Psi^*) \Psi) \right]$, тј. да можемо да дефинишемо струју честица на очекивани начин (ако имамо у виду интерпретацију $\Psi(\vec{r}, t)$ као макроскопске таласне функције):

$$\vec{J} = \frac{\hbar}{2m} (\Psi^* (-i\vec{\nabla})\Psi - ((-i\vec{\nabla})\Psi^*)\Psi).$$

Можемо се уверити да сама струја је егзактно дата и на следећи начин:

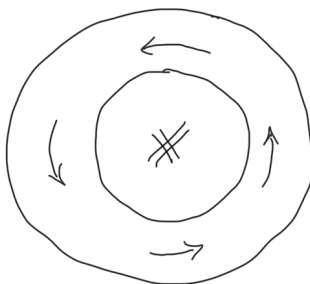
$$\vec{J} = \frac{\hbar}{m} \rho \vec{\nabla}\varphi,$$

и зато можемо описати локалну брзину суперфлуида преко градијента фазе:

$$\vec{v}_s = \frac{\hbar}{m} \vec{\nabla}\varphi.$$

Следи да $\vec{\nabla} \times \vec{v}_s = 0$, тј. течност је „неротациона“. У случају крутог тела $\vec{v} = \vec{\omega} \times \vec{r}$, $\vec{\nabla} \times \vec{v} = 2\vec{\omega}$ и ту могућност не видимо јер би то значило да макроскопски систем ротира.

Ипак разматрајмо нехомогену (неуниформну) ситуацију која се може добити ротацијом два цилиндра и настанком ротације нормалне течности Не I између њих и, затим, снижавањем температуре испод T_c :



5.12

Ако тако успоставимо ротациони ток (у Не II) важиће

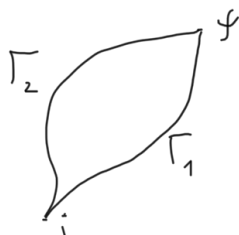
$$\oint \vec{v}_s d\vec{l} = \frac{\hbar}{m} \Delta\varphi,$$

где $\Delta\varphi$ је неопходан скок фазе и из једнозначности $\Psi(\vec{r})$ очекујемо $\Delta\varphi = n 2\pi$ – да је скок целобројни умножак 2π . Следи да је циркулација κ ,

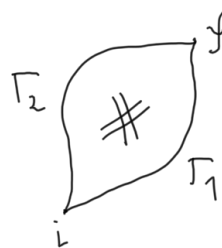
$$\kappa = \oint \vec{v}_s d\vec{l} = \frac{\hbar}{m} n,$$

тј. да је та величина која има значење ангуларног момента и карактерише ротацију и суперток, квантизована.

Размотримо поново, уопштено две могуће ситуације:



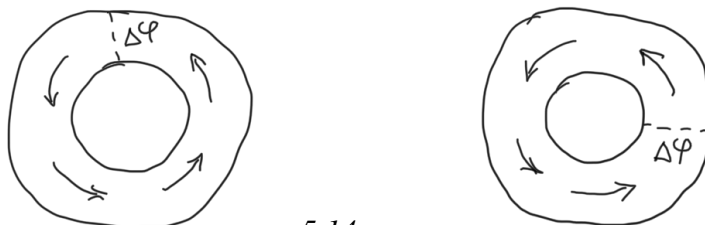
$$\int_{\Gamma_1}^f \vec{v}_s d\vec{l} = \int_{\Gamma_2}^f \vec{v}_s d\vec{l} = \varphi_f - \varphi_i$$



$$\int_{\Gamma_1}^f \vec{v}_s d\vec{l} - \int_{\Gamma_2}^f \vec{v}_s d\vec{l} = n 2\pi$$

5.13

При циркулацији постоји скок фазе: φ није једнозначна функција (може бити 0 или 2π) док Ψ јесте. Ток је исти независно од места скока (у ротационо симетричном случају):

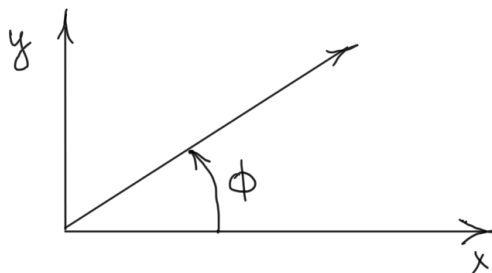


5.14

Закључили смо да локално важи $\vec{\nabla} \times \vec{v}_s = 0$ у хомогеном суперфлуиду. Покушајмо ипак да локално унесемо ротацију, и то нас доводи до следећег одељка:

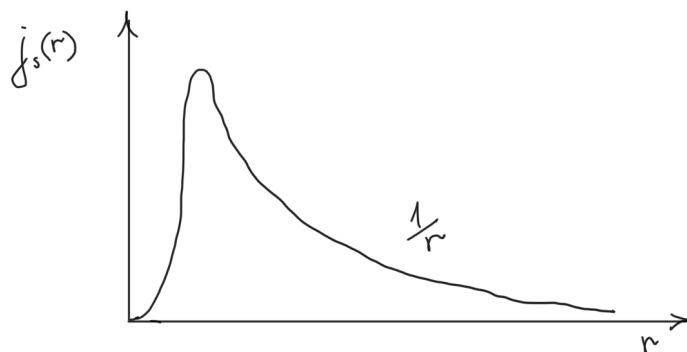
(Б) Вортексне ексцитације

Ако ротација постоји елементаран начин да дођемо до скока фазе је да идентификујемо фазу са поларном координатом угла у две димензије. (Посматрамо једноставан случај који је симетричан у односу на транслације у екстра димензији – дуж z осе.)



5.15

Очекујемо да $\lim_{|\vec{r}| \rightarrow \infty} \Psi_v = \sqrt{\rho_0} e^{in\phi}$, $\rho_0 = \text{Const}$, тј. $\varphi(\vec{r}) = n\phi$, и да је густина флуида униформна јер смо далеко од центра ротације. Следи $\lim_{|\vec{r}| \rightarrow \infty} \vec{v}_s = \frac{\hbar}{m} \frac{1}{r} n \hat{e}_\phi$ и $\vec{\nabla} \times \vec{v}_s = 0$. Ако моделујемо понашање за мање r као $\Psi_v = \sqrt{\rho(r)} e^{in\phi}$ и даље та својства важе. Међутим поставља се проблем понашања за $|\vec{r}| \rightarrow 0$. Зато је неопходно да и $\rho(r) \rightarrow 0$ тј. $\rho_s(r) \rightarrow 0$ у истом лимесу. Сам суперток $j_s(r) = \rho_s(r) v_s$ око центра вортекса можемо описати на следећи начин:

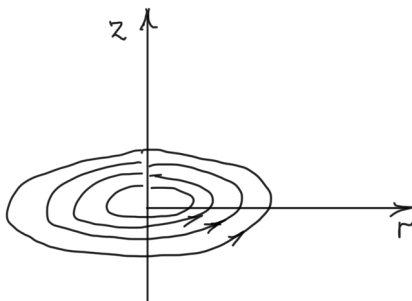


5.16

Дакле, $\rho_s(r) \rightarrow 0$ кад $r \rightarrow 0$, да би се избегао математички сингуларитет (неодређеност) функције $e^{in\phi}$ у $r = 0$.

Напомена: У опису фазе $\varphi(\vec{r}) = n\phi$, n је „тополошки број“. Претпоставимо $\varphi(\vec{r}) = n\phi \rightarrow \varphi'(\vec{r}) = n\phi + \chi(\vec{r})$, где је $\chi(\vec{r})$ једнозначна, континуална функција. Тиме се физички опис мења $\vec{v} \rightarrow \vec{v}'$, али циркулација, тополошки број (n), се не мења.

Посматрајмо у дводимензионој равни вортексну линију:



5.17

Оценимо енергију ове вортексне ексцитације (L_z је дужина система дуж z осе).

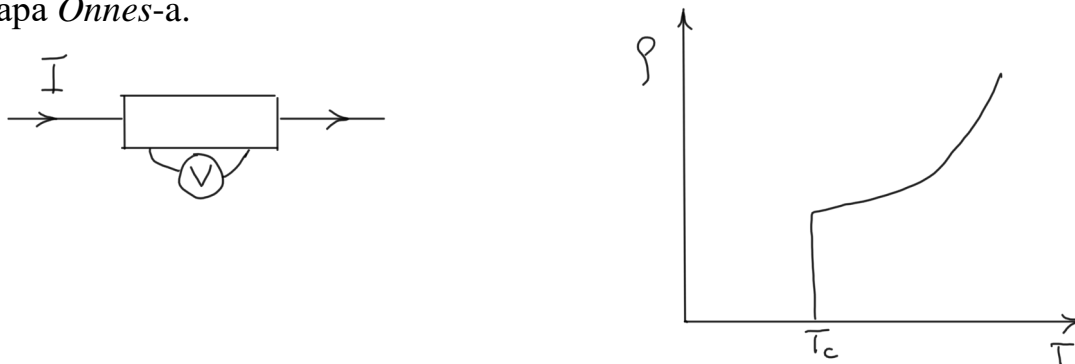
$$E_v \approx L_z 2\pi \int_{r_0}^R dr r \rho \frac{\vec{v}^2}{2} \sim n^2 \ln \frac{R}{r_0}$$

(Ограничили смо се на допринос када је $\rho = \text{Const}$ тј. искључили допринос централног дела (“*core*”) вортекса.) Закључујемо да је немогућа (усамљена) вортексна ексцитација у бесконачном суперфлуиду ($R \rightarrow \infty$).

6. Суперпроводност

(A) Особине

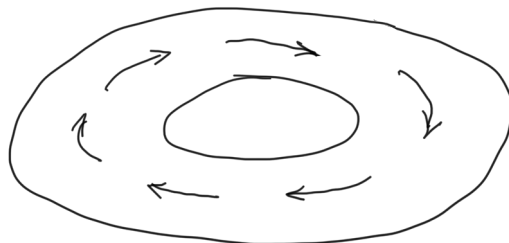
Феноменолошки суперпроводност можемо да карактеришемо као протицање електричне струје без отпора. Тако је и детектована у експериментима на живи, на ниским температурама, $T \lesssim 4 K$, 1911. године, од стране холандског физичара *Onnes*-а.



6.1

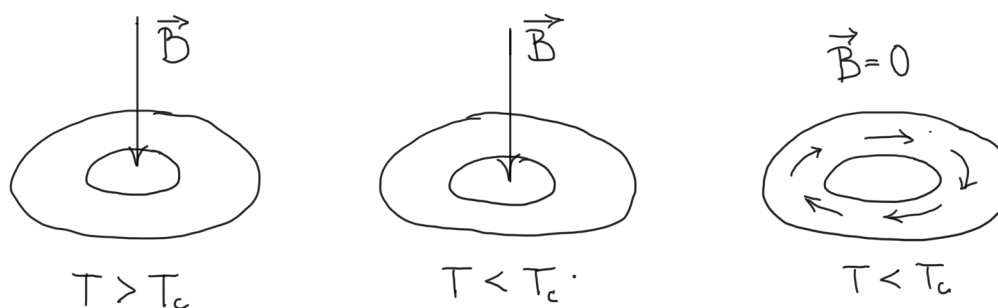
Микроскопски очекујемо, да у случају стационарног тока, $\vec{j} = \frac{1}{\rho} \vec{E}$, и ако $\rho = 0$ да и $\vec{E} = 0$ у суперпроводнику.

Слична феноменолошка карактеристика је постојање тзв. непрекидних струја тј. временски неограничено кружење струје.



6.2

Како индуковати такву струју у суперпроводнику? Очекујемо да ћемо променом (магнетног) флукса, кроз централни део – шупљину у систему, индуковати такву стационарну струју. Због тога што је $\vec{E} = 0$ у суперпроводнику, следи да $\frac{\Delta\Phi}{\Delta t} = 0$, ако применимо Фарадејев закон. Дакле $\Phi = Const$ ако флукс пролази кроз унутрашњост затворене путање(а) у суперпроводнику. Зато разматрајмо следеће ситуације, када у присуству флукса снизимо T испод T_c за суперпроводник и затим искључимо магнетно поље:



6.3

Индуковали смо струју, тј. суперпроводник надокнађује изостанак спољашњег флукса, и ствара свој флукс који се не мења са временом.

Да би боље разумели ову појаву посматрајмо суперпроводник као наелектрисани суперфлуид са параметром уређења:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sqrt{n(\vec{r}, t)} e^{i\varphi(\vec{r}, t)}.$$

Очекујемо да се струја честица изражава на следећи начин:

$$\vec{j} = \frac{1}{2m^*} \left(\Psi^* \left(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q^*}{c}\vec{A} \right) \Psi + \left(\left(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q^*}{c}\vec{A} \right) \Psi \right)^* \Psi \right),$$

тј. уградили смо изразе за „механичке импулсе“ (који су пропорционални-одговарају физичким брзинама) у струју, који су *gauge*-инваријантни. У горњем изразу су m^* и q^* ефективене, маса и наелектрисање, честица које

чине струју. Следи из $\vec{j} = |\Psi|^2 \vec{v}_s$, да брзину суперфлуида можемо изразити као

$$\vec{v}_s = \frac{\hbar}{m^*} \vec{\nabla} \varphi - \frac{q^*}{cm^*} \vec{A}.$$

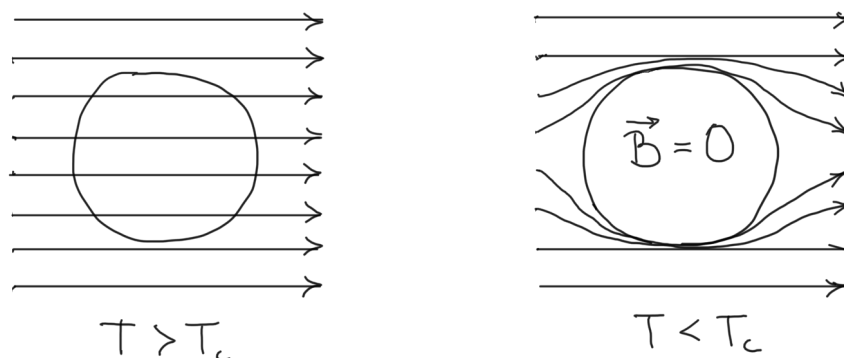
Дакле, искључивши магнетно поље ($\vec{A} = 0$) индуковали смо скок фазе који подржава непрекидну струју.

Такође, можемо се уверити да за наелектрисани суперфлуид важи:

$$\vec{\nabla} \times \vec{v}_s = - \frac{q^*}{cm^*} \vec{B}.$$

Ако би хтели да успоставимо униформно магнетно поље то би изазвало ротацију целог система што је термодинамички неисплативо. Зато у унутрашњости суперпроводника очекујемо:

$$\vec{B} = 0 \quad \text{тј. } Meissner\text{-ов ефекат.}$$



6.4

Meissner-ов ефекат је карактеристика суперпроводника која се опажа у термодинамичкој равнотежи и зато не зависи од историје тј. да ли је прво магнетно поље било присутно у систему па смо снизили температуру испод критичне за суперпроводност, или смо суперпроводни систем подвргли магнетном пољу. Зато је *Meissner*-ов ефекат битна карактеристика суперпроводника. Детаље присуства магнетног поља или магнетног флукса на површини суперпроводника као и могућност појаве у унутрашњости

посебне врсте суперпроводника описаћемо у оквиру Гинзбург-Ландау описа суперпроводника:

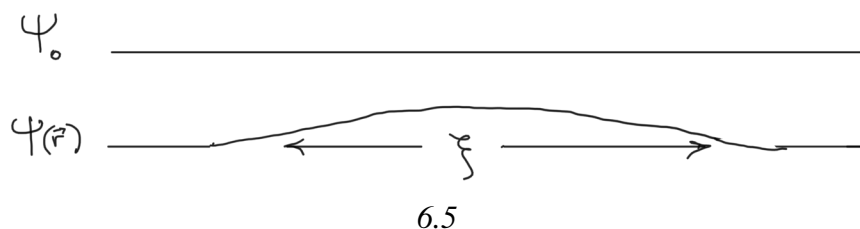
(Б) Гинзбург-Ландау опис

Гинзбург-Ландау (ГЛ) опис је настао пре микроскопског *Bardeen-Cooper-Schrieffer* (БКШ) описа - теорије суперпроводности. ГЛ опис је у основи модерних описа физике у близини фазних прелаза. Домен важности и примене овог прилаза је широк и користимо га да опишемо утицај електромагнетног поља на суперпроводник.

ГЛ опис можемо укратко дефинисати као уопштавање Ландау описа фазних прелаза узимањем у обзир флуктуација (промена) параметра уређења. Важна претпоставка је да смо близу фазног прелаза. Уопштавамо Ландау опис тј. развој функције слободне енергије преко параметра уређења,

$$F(\Psi, \Psi^*) \sim |\Psi|^2 + g |\Psi|^4 + \dots,$$

на опис преко функционала слободне енергије $F[\Psi(\vec{r}), \Psi^*(\vec{r})]$. Уопштење $\Psi \rightarrow \Psi(\vec{r})$ је важно јер флуктуације су важне: налазимо се у близини фазног прелаза и мера флуктуација (мера промена у простору) - корелациона дужина ξ је веома велика:



Сав опис је ефективан јер издвајамо најважнију дуготаласну физику близу прелаза и уносимо само члан $\sim |\vec{\nabla}\Psi|^2$ у развој. ГЛ функционал је

$$F_S[\Psi(\vec{r}), \Psi^*(\vec{r})] = F_n + \int f d\vec{r},$$

где
$$f = a|\Psi|^2 + \frac{1}{2m^*} \left| \left(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q^*}{c}\vec{A} \right) \Psi \right|^2 + \frac{b}{2} |\Psi|^4 + \frac{1}{8\pi} \vec{B}^2.$$

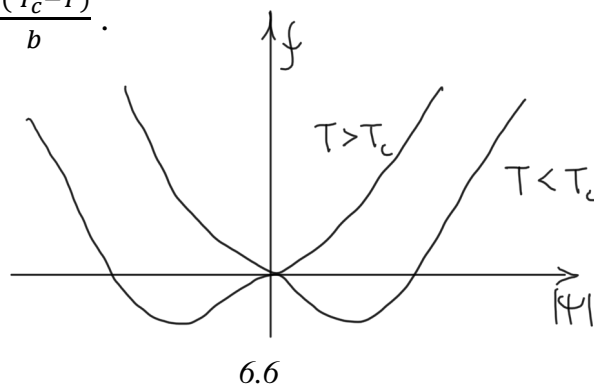
F_n представља слободну енергију нормалне фазе.

Функционал $F_S[\Psi(\vec{r}), \Psi^*(\vec{r})]$ је важан јер улази (како се показује у модерним прилазима) у опис вероватноће да се специфична конфигурација $\Psi(\vec{r})$ догоди

$$P[\Psi(\vec{r}), \Psi^*(\vec{r})] \sim e^{-\beta F[\Psi(\vec{r}), \Psi^*(\vec{r})]}.$$

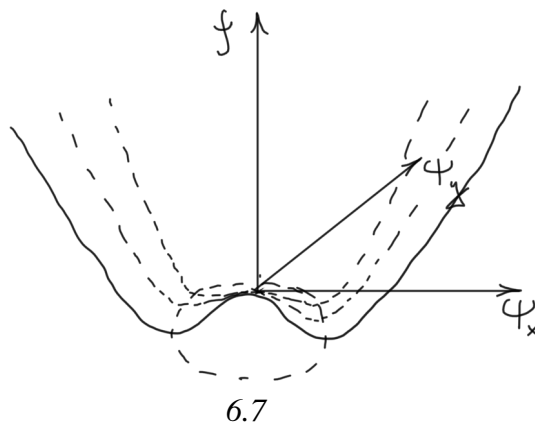
Дакле у модерним описима могуће је узимање у обзир свих могућих конфигурација (= флукуација) $\Psi(\vec{r})$. Ако захтевамо стационарност F у односу на варијације $\Psi(\vec{r})$ и $\Psi^*(\vec{r})$, долазимо до Гинзбург-Ландау (Грос-Питаевски) једначине(а) када разматрамо наелектрисан (неутралан) суперфлуид. Тиме смо се ограничили само на конфигурације највеће вероватноће (минимум F) тј. примењујемо „усредњен приступ“ или „приступ средњег поља“. У даљем ми ћемо користити такав прилаз при разматрању нехомогених ситуација, када је неопходно уопштити Ландау опис на начин просторно зависног $\Psi(\vec{r})$.

Али пре свега размотримо хомогени случај, без присуства \vec{A} . Минимизацијом f добијамо $|\Psi_{min}| = \sqrt{-\frac{a}{b}} = |\Psi_0|$, и $f(|\Psi_0|) = -\frac{a^2}{2b}$. Користимо претпоставку Ландау описа да $a = \bar{a}(T - T_c)$. Дакле за $T > T_c$, $|\Psi_0| = 0$, а за $T < T_c$, $|\Psi_0| = \sqrt{\frac{\bar{a}(T_c - T)}{b}}$.



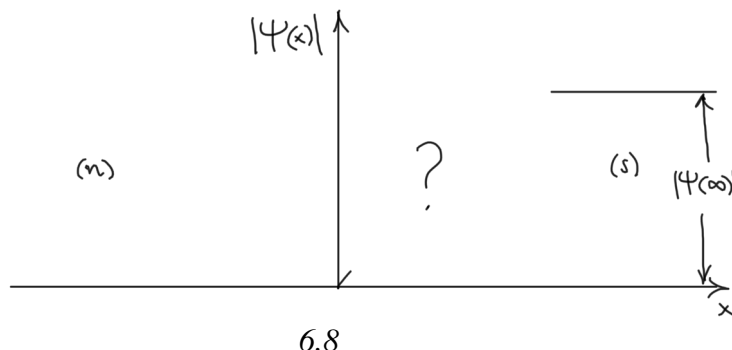
6.6

Како је $\Psi(\vec{r})$ по дефиницији комплексно, избор Ψ_0 представља и избор правца у дводимензионој равни тј. представља спонтано нарушење глобалне $U(1)$ симетрије.



6.7

(a) У овом одељку идентификоваћемо једну од две карактеристичне дужине које се појављују у ГЛ опису (једначинама). Описаћемо дужину кохеренције која карактерише параметар уређења када дозволимо могућност нехомогености у усредњеном опису система, у одсуству електромагнетног поља ($\vec{A} = 0$). Пример нехомогености је граница између нормалног система (метала) и суперпроводника.



У даљем тражимо решење одговарајуће ГЛ једначине при задатим условом на граници: $|\Psi(x = 0)| = 0$. Дакле из $\frac{\delta F_s[\Psi(\vec{r}), \Psi^*(\vec{r})]}{\delta \Psi^*(\vec{r})} = 0$ добијамо

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + a\Psi + b|\Psi|^2\Psi = 0.$$

Ако уведемо смену:

$$f(x) = \frac{\Psi(x)}{|\Psi_\infty|}, \quad |\Psi_\infty| = \sqrt{\frac{|a|}{b}},$$

$$-\xi_T^2 \frac{d^2f}{dx^2} - f + f^3 = 0.$$

Увели смо величину са димензијом дужине, ξ_T – дужину кохеренције:

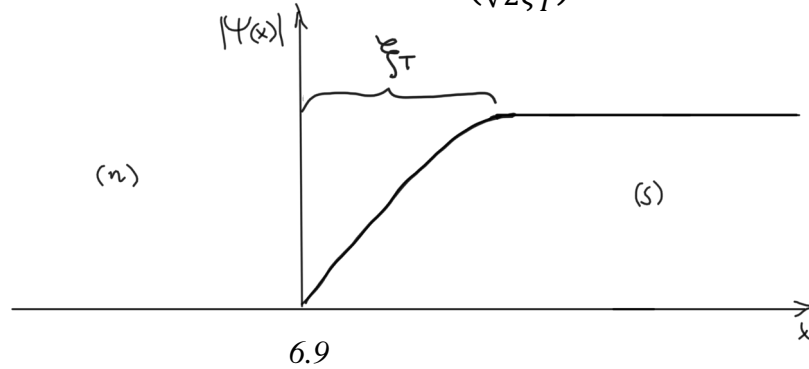
$$\xi_T = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m^* \bar{a} |T_c - T|}}.$$

Први интеграл диференцијалне једначине је

$$\xi_T^2 \left(\frac{df}{dx}\right)^2 = \frac{1}{2} (1 - f^2)^2.$$

Заиста $\frac{df}{dx} \rightarrow 0$, како $f \rightarrow 1$. Следи преко елементарне интеграције да

$$\Psi(x) = |\Psi_\infty| \tanh\left(\frac{x}{\sqrt{2}\xi_T}\right).$$



Дужина кохеренције - ξ_T је карактеристика суперпроводника: у овом примеру описује колико је (дужински) потребно да се суперпроводник врати у униформно стање у унутрашњости. У ГЛ формализму (без електромагнетног поља) то је једина дужина и мора бити исто што и корелациона дужина (фазног прелаза), $\xi \equiv \xi_T$ (која по дефиницији описује корелације параметра уређења). Дужина кохеренције се може дефинисати и разматрати за произвољну температуру (не само T у околини T_c) суперпроводника.

(б) Друга важна дужина (у ГЛ опису) карактерише дубину уласка магнетног поља у суперпроводник ($\vec{B} = 0$ у унутрашњости). Да би писали \vec{B} морамо да нађемо још једну везу између: $\vec{j} \equiv \vec{j}_{el}$ (електрична струја) $\leftrightarrow \vec{B}$ (поред Макселове једначине, релацију сличну $\vec{j} = \sigma \vec{E}$ у обичном металу). Зато дефинишемо \vec{j} као струју наелектрисања (а не честица):

$$\begin{aligned} \vec{j} \equiv \vec{j}_{el} &= \frac{q^*}{2m^*} \left[\Psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{q^*}{c} \vec{A} \right) \Psi + \left(\left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{q^*}{c} \vec{A} \right) \Psi \right)^* \Psi \right] \\ &= |\Psi|^2 \left[\frac{q^* \hbar}{m^*} \vec{\nabla} \varphi - \frac{(q^*)^2}{m^* c} \vec{A} \right] \end{aligned}$$

Задајмо $q^* = -2e$, $m^* = 2m$ и $n_s = 2|\Psi|^2$, где су e и m су наелектрисање и маса електрона. (То се подудара са нашим очекивањем да струју чине парови електрона.)

$$\vec{j} = |\Psi|^2 \left[-\frac{e \hbar}{m} \vec{\nabla} \varphi - 2 \frac{e^2}{m c} \vec{A} \right].$$

У даљем користимо апроксимацију $|\Psi|^2 = Const$ (која у неким случајевима није оправдана). Следи

$$(1) \quad \vec{\nabla} \times \vec{j} = - \frac{e^2 n_s}{m c} \vec{B}.$$

Друга важна једначина је

$$(2) \quad \vec{\nabla} \times \vec{B} = \frac{4\pi}{c} \vec{j},$$

тј. Амперов закон - Максвелова једначина уз претпоставку стационарности

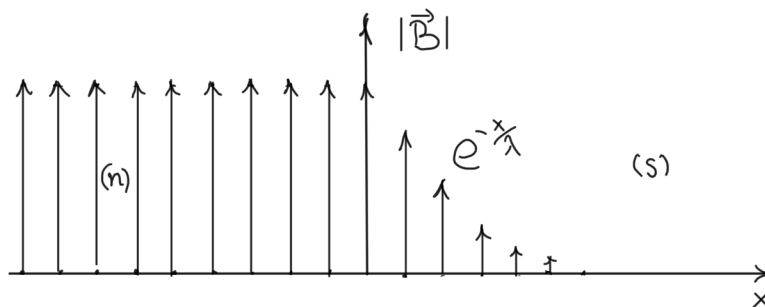
$\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = 0$. Сређивањем једначина по \vec{B} добијамо:

$$\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{B}) = - \Delta \vec{B} + \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{B}) = - \frac{4\pi e^2 n_s}{m c^2} \vec{B}.$$

Зато

$$\Delta \vec{B} = \frac{4\pi e^2 n_s}{m c^2} \vec{B} = \frac{1}{\lambda^2} \vec{B},$$

са карактеристичном дужином λ - London-овом дужином.



6.10

Дужина λ карактерише улазак магнетног поља у суперпроводник и има исти карактеристичну зависност од T (близу T_c) као дужина кохеренције.

$$\frac{1}{\lambda} \sim \sqrt{n_s} = \sqrt{2|\Psi_0|^2} \sim \sqrt{|T_c - T|},$$

тј. дивергира како $T \rightarrow T_c$.

(в) У овом одељку описаћемо могуће вортексне ексцитације у суперпроводнику тј. наелектрисаном суперфлуиду. Почињемо од исте конструкције као у случају (неутралног) суперфлуида:

$$\Psi(\vec{x}) \sim e^{in\phi}, \quad \text{тј. } \varphi = n\phi.$$

Да ли у овом случају можемо „избором“ \vec{A} да пригушимо споро – алгебарско опадање квадрата брзине, $|\vec{v}|^2 \sim \frac{1}{r^2}$, у неутралном суперфлуиду? Тј. да ли постоји вортексна конфигурација која је енергетски стабилна?

$$\left| \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{q^*}{c} \vec{A} \right) \Psi \right|^2 \xrightarrow{|\vec{r}| \rightarrow \infty} \text{брже него } \frac{1}{|\vec{r}|^2} \rightarrow 0 ?$$

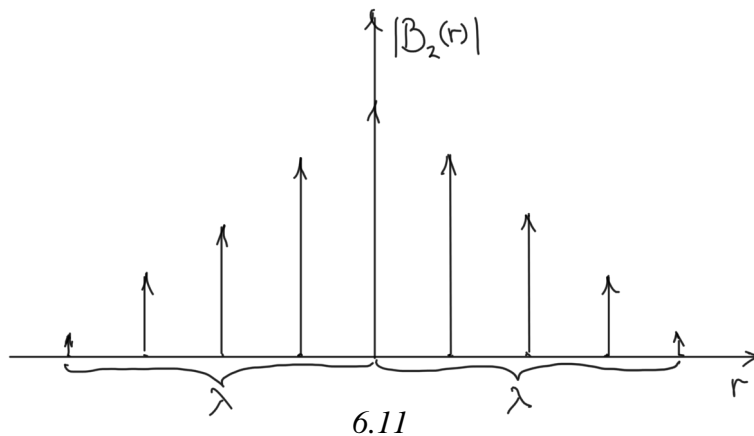
Избор који се намеће, када $|\vec{r}| \rightarrow \infty$, је

$$\frac{q^*}{c} \vec{A} = \hbar \frac{n}{r} \hat{e}_\phi.$$

У том случају следи да, ако је интеграл по кружној путањи далеко од центра вортекса:

$$\oint \vec{A} d\vec{l} = \frac{\hbar c}{q^*} n,$$

тј. вортекс карактерише флуks који је квантизован, где је $\phi_0 = \frac{\hbar c}{2e}$, квант флуksа. Из претходних разматрања ГЛ описа можемо очекивати да се улазак магнетног поља у суперпроводник на начин креирања вортексних ексцитација може карактерисати дужином λ :

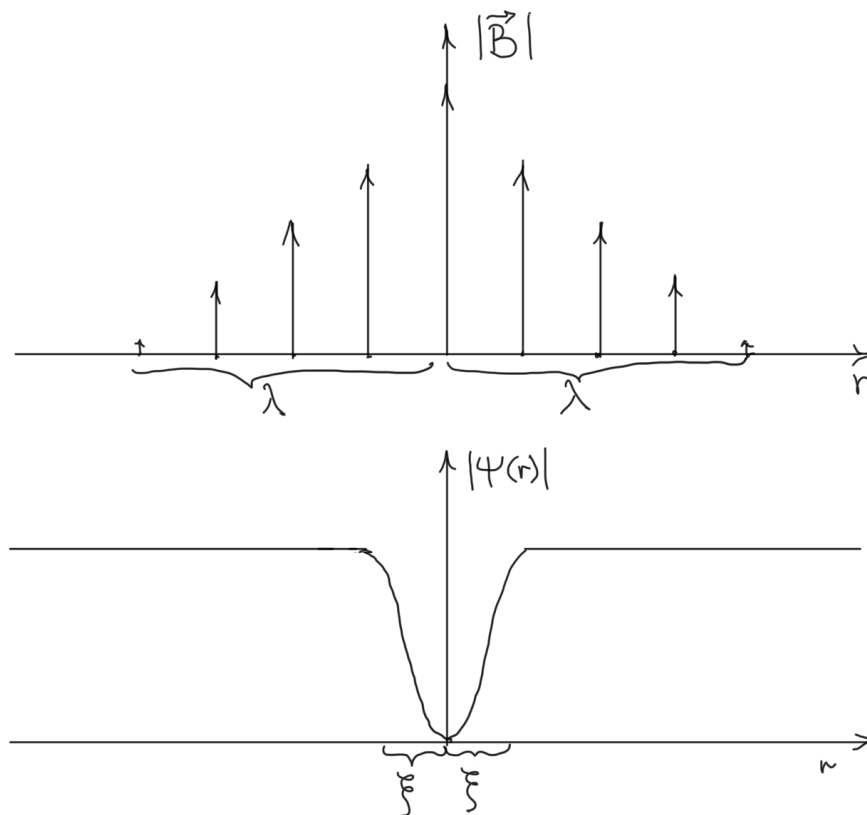


$$\lim_{|\vec{r}| \rightarrow \infty} \vec{B} = \lim_{|\vec{r}| \rightarrow \infty} \vec{\nabla} \times \vec{A} = 0$$

Разматрајмо једначину за B_z (магнетно поље дуж осе симетрије): $\Delta B_z = \frac{1}{\lambda^2} B_z$.

За $r \ll \lambda$: $\Delta B_z = \frac{d^2 B_z}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dB_z}{dr} \approx 0$ и зато очекујемо $B_z \sim \ln r$ како $r \rightarrow 0$. Математичка дивергенција је последица апроксимације $|\Psi|^2 = \text{Const}$, коју смо применили да би добили једначину за B_z . Зато је неопходно $|\Psi(r=0)|^2 =$

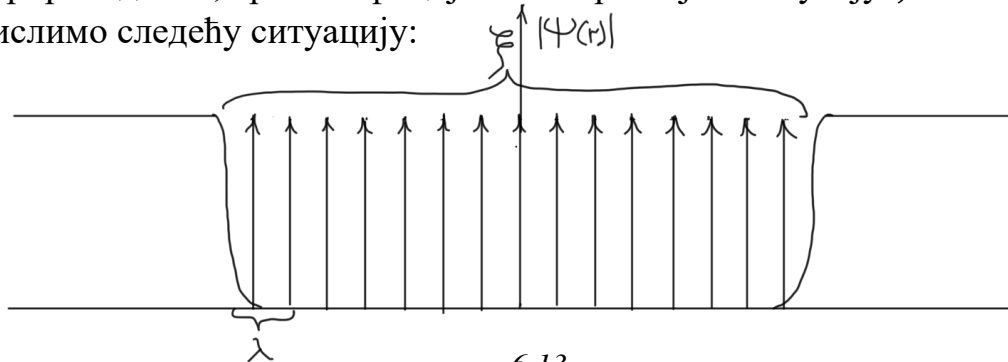
0 (слично случају неутралног суперфлуида). Дакле стабилна конфигурација вортекса може да се опише схематски:



6.12

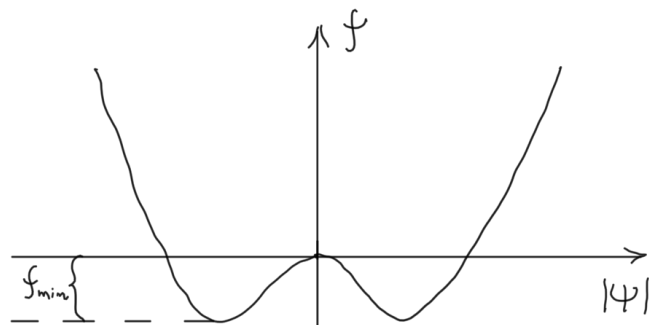
Дакле за стабилну вортексну конфигурацију очекујемо : $\xi \lesssim \lambda$.

Али разматрајмо ситуацију $\xi \gg \lambda$ која постоји у случају „слабих“ (БКШ) суперпроводника. Сами ξ и λ носе специфичне карактеристике суперпроводника, кроз коефицијенте ГЛ развоја. У случају $\xi \gg \lambda$ можемо да замислимо следећу ситуацију:



6.13

која се може описати као „когзистенција фаза“ тј. као прелаз I врсте (при уласку магнетног поља).



6.14

$$|f_{min}| = \frac{a^2}{2b} = \frac{H_{cr}^2}{8\pi},$$

где са H_{cr} смо обележили критично спољашње (примењено) магнетно поље.

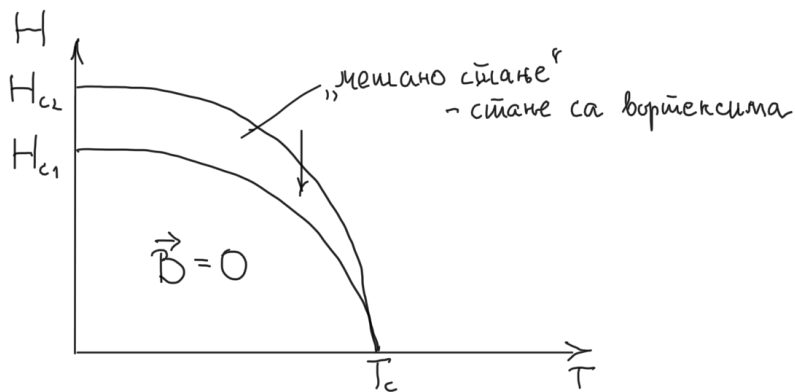
У тим суперпроводницима нема могућности за „мешана стања“ суперпроводне и нормалне фазе. Може се показати (*Annett* књига), у оквиру ГЛ описа да са

$$\xi > \sqrt{2} \lambda,$$

карактеришемо суперпроводнике I врсте (у којима не постоји V у унутрашњости у виду вортексних ексцитација). Однос

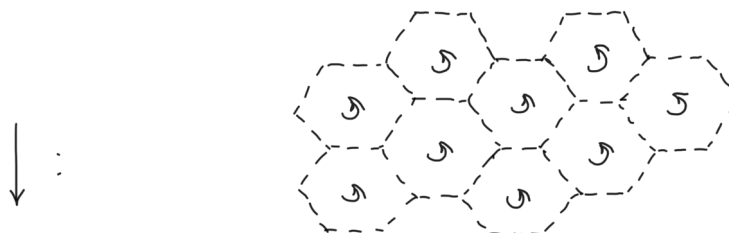
$$\xi < \sqrt{2} \lambda,$$

карактерише суперпроводнике II врсте. Њихов фазни дијаграм у присуству V , тачније H – примењеног (спољашњег) магнетног поља је сложенији:



6.15

Између два критична поља H_{c1} и H_{c2} постоји „мешање фаза“. На H_{c2} може се показати у оквиру ГЛ формализма постојање конфигурације најгушће могуће пакованих вортексних ексцитација: Абрикосов решетка (Annett књига). Дакле фазу између H_{c1} и H_{c2} карактерише делимично присуство V на начин вортексних ексцитација.

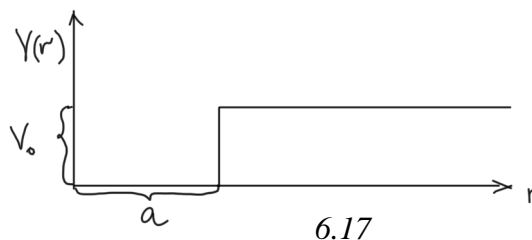


6.16

(В) Куперов пар

Куперов проблем је разматрање издвојеног пара електрона који се привлаче у присуству Ферми мора других електрона. Разматрање истиче, на начин физичког аргумента, важност Паули блокирања: Паули блокирање (недоступност стања испод Ферми нивоа услед Ферми статистике) поспешује стварање парова (у присуству одређене привлачне интеракције).

Посматрајмо издвојени пар честица у три димензије са релативном координатом \vec{r} у присуству сферне потенцијалне јаме ширине a и дубине V_0 .



6.17

Ако својствено решење тражимо преко $\tilde{\Psi} = \Psi(r) r$, где $\Psi(r)$ је таласна функција решења, Шредингерова једначина (за s -wave стање) гласи

$$-\frac{d^2\tilde{\Psi}}{dr^2} + V(r)\tilde{\Psi}(r) = E\tilde{\Psi}(r).$$
 Везана стања су облика $\tilde{\Psi}(r) \sim \cos kr, \sin kr$, у овом ефективно једнодимензионом проблему, али $\Psi(r) = \frac{\tilde{\Psi}(r)}{r}$, тј. само

$\sim \sin kr$ решења постоје у три димензије. Дакле у три димензије постоји праг, потребна је довољно дубока (V_0) и широка (a) јама, да би постојало везано стање за две честице.

Важан део Куперовог аргумента је да ефективна интеракција између електрона, у издвојеном пару, је привлачна у близини Ферми нивоа и показује се да доводи до стварања везаног стања у присуству и најмање привлачне интеракције.

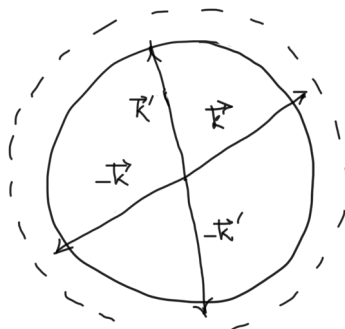
Присуство других електрона је укључено преко забране да импулси пара, $|\vec{k}_1|$ и $|\vec{k}_2|$, буду мањи од k_F (Ферми импулса) тј. да важи $|\vec{k}_1| \geq k_F$ и $|\vec{k}_2| \geq k_F$ („Паули блокирање“). Узмимо $\hbar = 1$, и нека су координате два електрона \vec{r}_1 и \vec{r}_2 и импулси \vec{k}_1 и \vec{k}_2 . За релативно кретање: $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$, $\vec{k} = \frac{\vec{k}_1 - \vec{k}_2}{2}$, а за кретање центра масе: $\vec{R} = \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2}$, $\vec{K} = \vec{k}_1 + \vec{k}_2$, тако да $e^{i\vec{k}_1\vec{r}_1} e^{i\vec{k}_2\vec{r}_2} = e^{i\vec{k}\vec{r}} e^{i\vec{K}\vec{R}}$. Импулс центра масе \vec{K} је константа кретања за проблем са интеракцијом $V(\vec{r})$. Дакле својствена стања можемо изразити у облику $\Psi_{\vec{K}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{e^{i\vec{K}\vec{R}}}{\sqrt{V}} \varphi(\vec{r})$, где

$\varphi(\vec{r}) = \sum_{|\vec{k}| \geq k_F} \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{\sqrt{V}} \alpha_{\vec{k}}$. Уведимо и матрични елемент:

$$V_{\vec{k}, \vec{k}'} = \frac{1}{V} \int d\vec{r} e^{-i(\vec{k} - \vec{k}')\vec{r}} V(\vec{r}).$$

Ако $\vec{K} = 0$, $\vec{k}_1 = \vec{k}$, $\vec{k}_2 = -\vec{k}$ матрични елемент има интерпретацију амплитуде судара Куперовог пара електрона са супротним импулсима.

$$V_{\vec{k}, \vec{k}'} = \langle \vec{k}, -\vec{k} | \hat{V} | \vec{k}', -\vec{k}' \rangle$$



6.18

Како је $\frac{\vec{k}_1^2 + \vec{k}_2^2}{2m} = \frac{4\vec{k}^2 + \vec{K}^2}{4m}$, и $\vec{K} = 0$, следи Шредингерова једначина за релативно кретање,

$$\left[-\frac{\nabla^2}{m} + V(\vec{r}) \right] \varphi(\vec{r}) = E \varphi(\vec{r}).$$

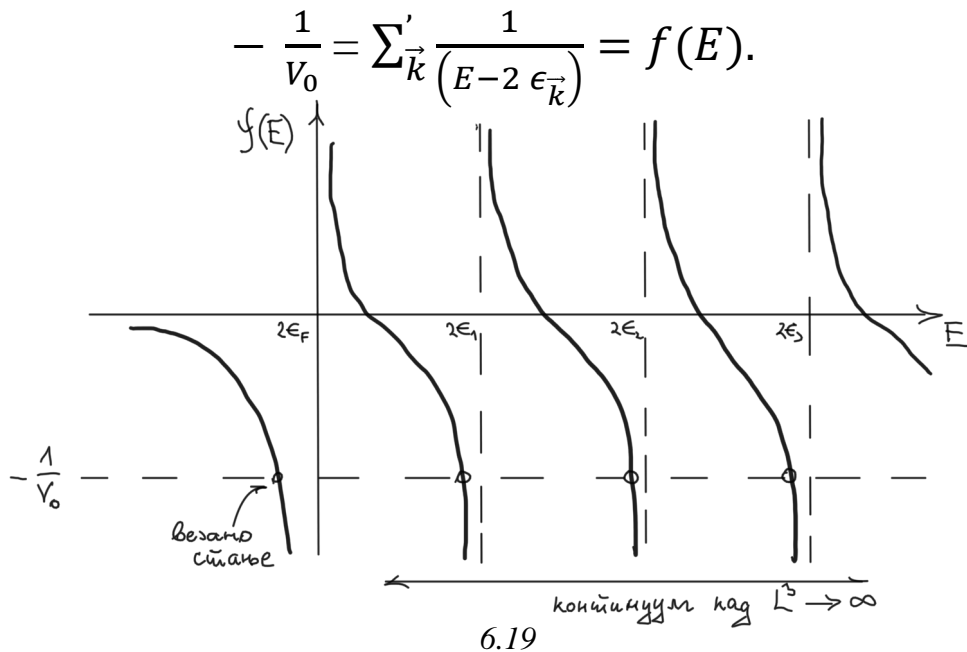
У базису стања $\frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{\sqrt{V}}$:

$$2 \epsilon_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k},\vec{k}'} \alpha_{\vec{k}'} = E \alpha_{\vec{k}}, \quad \text{где } \epsilon_{\vec{k}} = \frac{\vec{k}^2}{2m}.$$

Разматрајмо $V_{\vec{k},\vec{k}'} = -V_0$, где $V_0 = \text{Const} > 0$ само када $\epsilon_{k_F} \leq \epsilon_{\vec{k}}, \epsilon_{\vec{k}'} \leq \hbar\omega_D$ (Debye) фреквенца (за остале импулсе интеракција не постоји). Сама интеракција долази од електрон-фонон привлачне интеракције коју карактерише *cut-off*, $\hbar\omega_D$ тј. карактеристична максимална енергија осцилација атома кристалне решетке. Следи

$$(2\epsilon_{\vec{k}} - E) \alpha_{\vec{k}} = -V_0 \sum_{\vec{k}'}' \alpha_{\vec{k}'},$$

где смо суму посебно означили јер сумирамо само по импулсима за које важи $\epsilon_{k_F} \leq \epsilon_{\vec{k}'} \leq \hbar\omega_D$. Даљим сређивањем долазимо до једначине за могуће својствене енергије Куперовог пара:



Из графика функције $f(E)$ можемо да закључимо да постоји везано стање. До карактеристичне енергије можемо доћи прешавши на лимес великог система уз претпоставку да густина стања $\rho(\epsilon)$ је константна у малом распону енергија,

$$(\epsilon_F, \epsilon_F + \hbar\omega_D): \quad -\frac{1}{V_0} = - \int_{\epsilon_F}^{\epsilon_F + \hbar\omega_D} d\epsilon \rho(\epsilon) \frac{1}{2\epsilon - E} \approx -\frac{\rho(\epsilon_F)}{2} \int_{\epsilon_F}^{\epsilon_F + \hbar\omega_D} d\epsilon \frac{1}{\epsilon - \frac{E}{2}}.$$

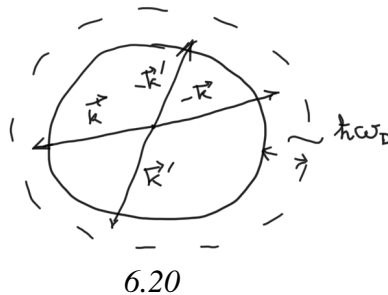
Следи

$$E = 2\epsilon_F - \frac{2 \hbar\omega_D e^{-\frac{2}{\rho(\epsilon_F)V_0}}}{\left(1 - e^{-\frac{2}{\rho(\epsilon_F)V_0}}\right)}.$$

У лимесу слабог купловања, $\rho(\epsilon_F) V_0 \ll 1$, видимо да не постоји праг за стварање везаног стања енергије,

$$E = 2\epsilon_F - 2 \hbar \omega_D e^{-\frac{2}{\rho(\epsilon_F)V_0}}.$$

Само $\hbar\omega_D$ је реда 100 К, али у изразу је и експоненцијални фактор.



6.20

Закључујемо да $\varphi(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{\sqrt{V}} \alpha_{\vec{k}}$ описује два електрона који се ексцитују изнад Ферми површине, привлачно интерагују и снижавају своју енергију образујући Куперов пар. Његова везивна енергија је

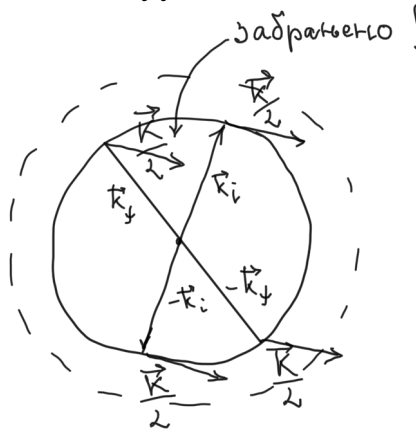
$$W = 2 \hbar \omega_D e^{-\frac{2}{\rho(\epsilon_F)V_0}}.$$

Шта се догађа у случају да $\vec{K} \neq 0$ тј. кад постоји ненулти импулс центра масе? Очекујемо да $2 \epsilon_{\vec{k}} \rightarrow \epsilon_{\vec{k} + \frac{\vec{K}}{2}} + \epsilon_{\vec{k} - \frac{\vec{K}}{2}} \Rightarrow \Delta E \sim o(\vec{K}^2)$. Да ли је то једина промена? Није! Морамо узети у обзир Паули блокирање тј. $\left| \vec{k} \pm \frac{\vec{K}}{2} \right| \geq k_F \Rightarrow$ (за

мало $|\vec{K}|$, $k \geq k_F \pm \frac{\vec{K}\hat{k}}{2}$, где $\hat{k} = \frac{\vec{k}}{|\vec{k}|}$. Промена доње границе у интеграцији

по ϵ доводи до
$$W = 2 \hbar \omega_D e^{-\frac{2}{\rho(\epsilon_F)V_0} - \frac{v_F|\vec{K}|}{2}},$$

у случају малог, коначног $|\vec{K}|$. Очекујемо да за довољно велико $|\vec{K}|$ пар може да се дисоцира и постане део континуума. Зашто такав утицај?



6.21

Због смањења броја могућих ниско лежећих стања (због забрањених канала расејања) Куперов пар не може ефикасно да снизи своју енергију.

Применимо (екстраполирамо) случај два електрона и постојања њиховог везаног стања на постојање прага Δ за екситације у суперпроводнику. Дефинишимо карактеристично $|\vec{K}|$ дисоцијације тј. карактеристичну дужину:

$$\xi_0 = \frac{\hbar v_F}{2 \Delta}.$$

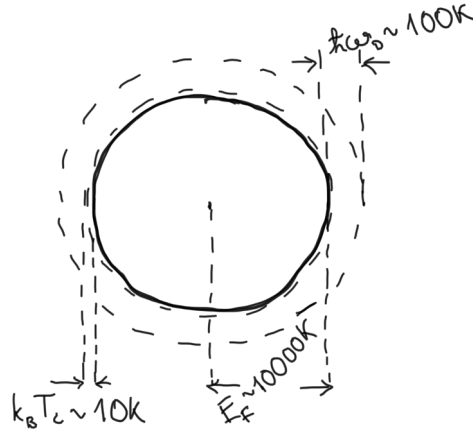
То је мера максималног $|\vec{K}|$: $K_{max} \sim \frac{1}{\xi_0}$ тј. мера максималног импулса Куперовог пара. Другим речима ξ_0 је мера размазаности координате пара, позната и као дужина кохеренције сада на $T = 0$.

Ако проценимо Δ на начин теорије БКШ тј. да је Δ реда критичне температуре за стварање суперпроводне фазе, чију вредност узимамо из експеримента на БКШ суперпроводнику, $2 \Delta \sim k_B T_c$, следи да је $\xi_0 \sim 10^{-3} \text{ nm}$. У односу на средње растојање између честица, a ,

$$\frac{\xi_0}{a} \sim 10^3!$$

тј. очекивани радијус Куперовог пара, $R_{CP} \sim \xi_0$, је много већи него средње растојање између честица.

Схематски можемо представити распон енергија у БКШ суперпроводнику:



6.22

Зато што је електрон-фононска интеракција јако слаба $k_B T_c \sim 10 K$. Оцена $R_{CP} \sim \xi_0 \gg a$, следи из $\frac{k_B T_c}{E_F} \sim \frac{2 \Delta}{\hbar k_F v_F} \sim \frac{a}{\xi_0}$, где $E_F \sim 10\,000 K$.

За таласну функцију Куперовог пара важи: $\varphi(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{\sqrt{V}} \alpha_{\vec{k}}$, $\alpha_{\vec{k}} = \frac{\sum_{\vec{q}} \alpha_{\vec{q}}}{2 \epsilon_{\vec{k}} - E}$.

Следи $\alpha_{\vec{k}} = \alpha_{-\vec{k}}$ тј. $\varphi(\vec{r}) = \varphi(-\vec{r})$. Закључујемо да Куперов пар мора бити спин-синглет:

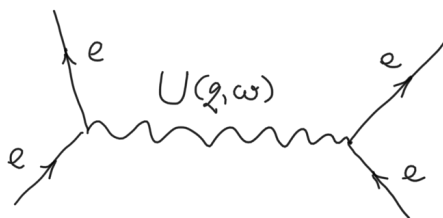
$$|\Psi\rangle_{CP} = |\varphi\rangle \times \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 - |\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2).$$

(Г) БКШ теорија – микроскопски опис

(а) БКШ опис се везује за слабо интерагујуће системе. У њима очекујемо стварање Куперових парова – мали кондензат око Ферми енергије тј. мали део од укупног броја електрона. Можемо рећи да постоји „парадокс“: да са тако малим енергијама око Ферми енергије мења се фаза система и да у супертоку на $T = 0$ учествују сви електрони. Објашњење лежи у Ферми-Дирак статистици, да електрони који су дубље у Ферми мору немају могућност ексцитовања да би се тиме деградирао ток (а они близу Ферми површи не ексцитују се због постојања енергетског процепа).

За електрон-фононску интеракцију можемо да проценимо купловање (бездимензиону величину) $\rho(\epsilon_F)V \lesssim 0.3$, из чега следи да највише T_c су реда $10 - 20 K$. У експериментима на откривеним суперпроводницима детектују се максималне $T_c \sim 100 K$, где очекујемо друге механизме у односу на електрон-фононски, електрони су јако корелисани и $\xi_0 \sim a$.

У многочестичном (временски зависном, пертурбационом) прилазу може се описати ефективна електрон-електрон интеракција која настаје приликом размене фонона.

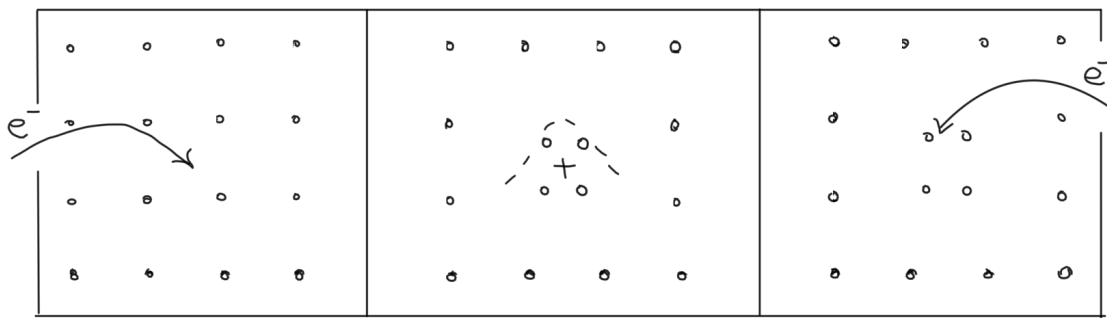


6.23

Може се показати да у статичком лимесу

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} U(q, \omega) = -\gamma^2 \theta(\omega_D - \omega_q),$$

тј. интеракција је привлачна са *cut-off*-ом ω_D . Процес настанка такве привлачне интеракције међу електронима можемо илустровати једним „стрипом“: електрон улази, нормално на раван цртежа, и изазива деформацију (позитивних наелектрисања) решетке. Други електрон је привучен том деформацијом и то је разлог стварања пара.



6.24

(б) БКШ микроскопски опис:

БКШ опис уводимо слично разматрању спонтаног нарушења симетрије у Бозе системима преко (оператора) термодинамичког потенцијала:

$$\hat{\Omega} = \sum_{\vec{k}, \sigma} (\epsilon_{\vec{k}} - \mu) c_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger} c_{\vec{k}, \sigma} + \frac{1}{2V} \sum_{\substack{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{q} \\ \sigma_1, \sigma_2}} V(\vec{q}) c_{\vec{k}_1 + \vec{q}, \sigma_1}^{\dagger} c_{\vec{k}_2 - \vec{q}, \sigma_2}^{\dagger} c_{\vec{k}_2, \sigma_2} c_{\vec{k}_1, \sigma_1}.$$

Главна претпоставка БКШ да се у суперпроводнику ефективна, доминантна физика своди на физику Куперових парова, и то уграђујемо тако што редукујемо $\hat{\Omega}$ (односно део са интеракцијом) на Куперов канал. Уобичајено је и да се уноси електрон-електрон интеракција услед размене фонона као ефективно контактна интеракција: $V(\vec{q}) = -g, g(= Const) > 0$, али уз *cut-off* Дебајеве енергије, ω_D . Дакле,

$$\hat{\Omega}_{eff} = \sum_{\vec{k}, \sigma} (\epsilon_{\vec{k}} - \mu) c_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger} c_{\vec{k}, \sigma} - \frac{g}{V} \sum'_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} c_{\vec{k}_1, \uparrow}^{\dagger} c_{-\vec{k}_1, \downarrow}^{\dagger} c_{-\vec{k}_2, \downarrow} c_{\vec{k}_2, \uparrow}.$$

У обичној Бозе кондензацији основно стање $|\Psi_0\rangle$ је суперпозиција различитих бројева $\vec{k} = 0$ честица.

$$\langle \hat{a}_0 \rangle \neq 0 \quad \Rightarrow \quad \langle \Psi(\vec{r}) \rangle \neq 0.$$

Овде $|\Psi_0\rangle$ очекујемо као суперпозицију различитог броја Куперових парова. Зато очекујемо:

$$\langle \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow} \hat{c}_{\vec{k}\uparrow} \rangle \neq 0 \quad \Rightarrow \quad \langle \Psi_{\downarrow}(\vec{r}) \Psi_{\uparrow}(\vec{r}) \rangle \neq 0.$$

Претпостављамо слабе флуктуације и примењујемо Богољубовљев прилаз ($\hat{O} \rightarrow 0$) тј. прилаз средњег поља:

$$\begin{aligned} \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow} \hat{c}_{\vec{k}\uparrow} &= \langle \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow} \hat{c}_{\vec{k}\uparrow} \rangle + \delta_{\vec{k}} \\ c_{\vec{k}_1, \uparrow}^{\dagger} c_{-\vec{k}_1, \downarrow}^{\dagger} c_{-\vec{k}_2, \downarrow} c_{\vec{k}_2, \uparrow} &= - \langle c_{\vec{k}_1, \uparrow}^{\dagger} c_{-\vec{k}_1, \downarrow}^{\dagger} \rangle \langle c_{-\vec{k}_2, \downarrow} c_{\vec{k}_2, \uparrow} \rangle + c_{\vec{k}_1, \uparrow}^{\dagger} c_{-\vec{k}_1, \downarrow}^{\dagger} \langle c_{-\vec{k}_2, \downarrow} c_{\vec{k}_2, \uparrow} \rangle \\ &+ \langle c_{\vec{k}_1, \uparrow}^{\dagger} c_{-\vec{k}_1, \downarrow}^{\dagger} \rangle c_{-\vec{k}_2, \downarrow} c_{\vec{k}_2, \uparrow} + \delta_{\vec{k}_1} \delta_{\vec{k}_2} \end{aligned}$$

Ако занемаримо δ – те на крају урадили смо апроксимацију средњег поља.

Следи:

$$\hat{\Omega}_{BCS} = \sum_{\vec{k}, \sigma} \xi_{\vec{k}} c_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger} c_{\vec{k}, \sigma} + \sum_{\vec{k}} \Delta c_{\vec{k}, \uparrow}^{\dagger} c_{-\vec{k}, \downarrow}^{\dagger} + \sum_{\vec{k}} \Delta^* c_{-\vec{k}, \downarrow} c_{\vec{k}, \uparrow},$$

где $\xi_{\vec{k}} = \epsilon_{\vec{k}} - \mu$, и

$$\Delta = -\frac{g}{V} \sum_{\vec{k}}' \langle c_{-\vec{k},\downarrow} c_{\vec{k},\uparrow} \rangle,$$

је амплитуда спаривања. Апроксимацијом средњег поља смо редуковали проблем на разматрање појединачних Куперових парова за фиксирана \vec{k} у средњем пољу Δ . Узимамо $\Delta = \Delta^*$ јер сваку фазу у Δ можемо да уклонимо глобалном трансформацијом $c \rightarrow e^{i\alpha} c$, тј. бирамо најједноставнију репрезентацију стања нарушене симетрије $U(1)$. Решавамо проблем – дијагонализујемо $\hat{\Omega}_{BCS}$ канонском трансформацијом:

$$b_{\vec{k}\uparrow} = u_{\vec{k}} c_{\vec{k}\uparrow} - v_{\vec{k}} c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger,$$

$$b_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger = u_{\vec{k}} c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger + v_{\vec{k}} c_{\vec{k}\uparrow},$$

где $u_{\vec{k}} = u_{\vec{k}}^*$, $v_{\vec{k}} = v_{\vec{k}}^*$ и $u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2 = 1$. Тражимо да $\hat{\Omega}_{BCS}$, буде облика:

$$\hat{\Omega}_{BCS} = Const + \sum_{\vec{k},\sigma} E_{\vec{k}} b_{\vec{k},\sigma}^\dagger b_{\vec{k},\sigma}.$$

$$\begin{aligned} [b_{\vec{k},\sigma}, \hat{\Omega}_{BCS}] &= E_{\vec{k}} (u_{\vec{k}} c_{\vec{k}\uparrow} - v_{\vec{k}} c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger) \\ &= \xi_{\vec{k}} u_{\vec{k}} c_{\vec{k}\uparrow} + \xi_{\vec{k}} v_{\vec{k}} c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger + \Delta u_{\vec{k}} c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger - \Delta v_{\vec{k}} c_{\vec{k}\uparrow}. \end{aligned}$$

Следе једначине

$$E_{\vec{k}} u_{\vec{k}} = \xi_{\vec{k}} u_{\vec{k}} - \Delta v_{\vec{k}},$$

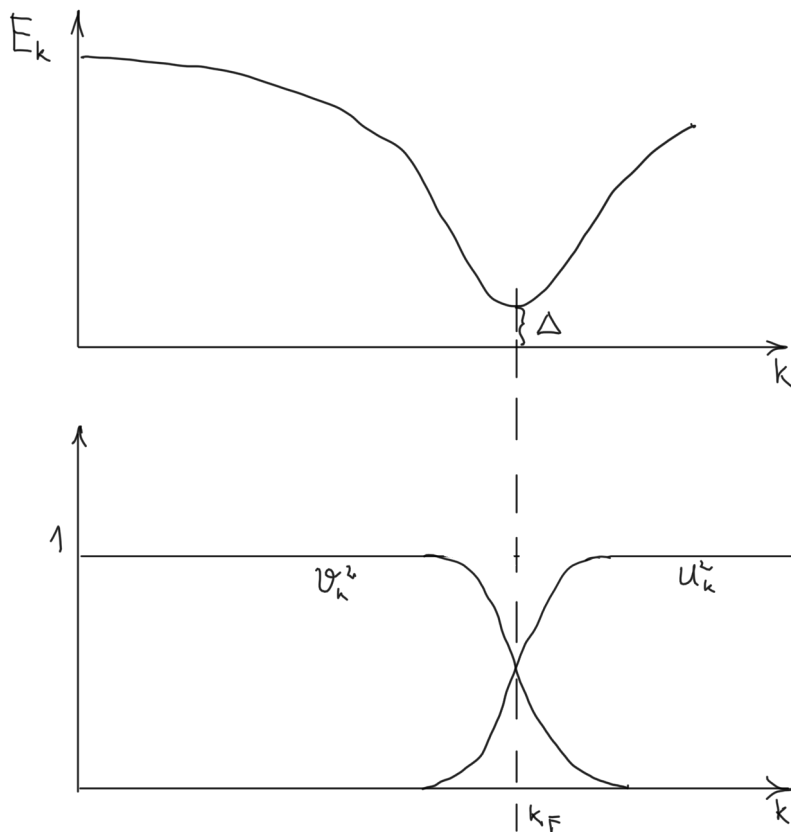
$$E_{\vec{k}} v_{\vec{k}} = -\xi_{\vec{k}} v_{\vec{k}} - \Delta u_{\vec{k}}.$$

Ако $|\vec{k}| \equiv k$ можемо описати решење:

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

$$v_k u_k = -\frac{\Delta}{2E_k}, \quad u_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_k}{E_k}\right) \quad \text{и} \quad v_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_k}{E_k}\right).$$

Спектар честица можемо илустровати:

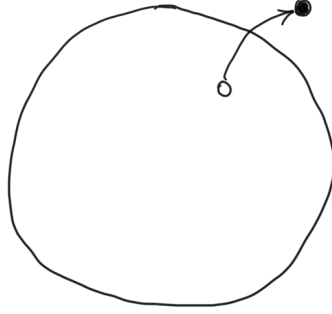


6.25

Сам распон релевантних k у околини Ферми нивоа је $\delta k \sim 10^{-3} k_F$ (према нашим претходним разматрањима) – екстремно мали интервал у односу на димензију Ферми сфере. Екситације $b_{k\sigma}$ су фермиони – „Богољубони“. Комбинације су честице (u_k) и шупљине (v_k) и добијају карактер шупљине за $k \ll k_F$ и честице за $k \gg k_F$. Неутралне су честице на k_F (не носе наелектрисање).

Уопште, постоји одређење честица-шупљина екситација које су екситације идеалног Ферми гаса неутралне природе (не размењују се електрони са околином) и сам спин система остаје исти:

$$c_{k>k_F,\sigma}^\dagger c_{k<k_F,\sigma} |FS\rangle.$$



6.26

Овде томе одговара $b_{\vec{k}_1\downarrow}^\dagger b_{\vec{k}_2\uparrow}^\dagger |\Psi_{BCS}\rangle$ уз услов да $\xi_{\vec{k}_1} = -\xi_{\vec{k}_2}$ да би то заиста била неутрална екситација. (Услов добијамо када распишемо екситацију преко оператора електрона и захтевамо да се наелектрисање не мења у односу на основно стање у средњем тј. добијамо $u_{k_1}u_{k_2} = v_{k_1}v_{k_2}$.) Закључујемо да је најнижа енергија екситација система $= 2\Delta$. То је енергија потребна да се раздвоји (дисоцира) Куперов пар.

(в) Енергетски процеп Δ можемо наћи из дефиниције $\Delta = -\frac{g}{V} \sum_{\vec{k}} \langle c_{-\vec{k},\downarrow} c_{\vec{k},\uparrow} \rangle$, где ћемо под очекиваном вредности $\langle \dots \rangle$ подразумевати термалну очекивану вредност и користити инверзне трансформације:

$$c_{\vec{k}\uparrow} = u_{\vec{k}} b_{\vec{k}\uparrow} + v_{\vec{k}} b_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger,$$

$$c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger = u_{\vec{k}} b_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger - v_{\vec{k}} b_{\vec{k}\uparrow}.$$

$$\text{Следи } \Delta = -\frac{g}{V} \sum_{\vec{k}} u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} (\langle b_{-\vec{k}\downarrow} b_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \rangle - \langle b_{\vec{k}\uparrow}^\dagger b_{\vec{k}\uparrow} \rangle) = \frac{g}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{\Delta}{2E_{\vec{k}}} (1 - f(E_{\vec{k}})),$$

где је $f(E_{\vec{k}})$ Ферми-Дирак расподела. Увек сумирамо у присуству *cut-off*-а датим преко Дебајеве енергије у околини Ферми енергије, и у лимесу великог система:

$$\Delta = g \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} d\epsilon \rho(\epsilon) \frac{\Delta}{2E_{\vec{k}}} (1 - f(E_{\vec{k}})), \text{ где смо урадили замену } \xi_{\vec{k}} \rightarrow \epsilon.$$

Очекујемо да важи $E_F \equiv \epsilon_F \gg \hbar\omega_D$ и узимамо $\rho(\epsilon) \approx \rho(\epsilon_F)$ у малом интервалу интеграције. Дакле

$$1 = g \rho(\epsilon_F) \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} d\epsilon \frac{1}{\sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2}} \tanh \frac{\sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2}}{2k_B T}.$$

Случај 1: $T = 0 \Rightarrow \sinh \frac{1}{g \rho(\epsilon_F)} = \frac{\hbar\omega_D}{\Delta}$, и за слабо купловање,

$$\Delta \approx 2 \hbar \omega_D e^{-\frac{1}{\rho(\epsilon_F)V_0}}.$$

(У експоненту нема 2 у односу на Куперов проблем, јер у спаривању учествују и честице испод и изнад k_F , зато $e^{-\frac{2}{2\rho(\epsilon_F)V_0}}$.)

Случај 2. $T = T_c$ и $\Delta = 0$. Решавањем горње једначине (нпр. *Fetter, Walecka*, књига) добија се

$$k_B T_c \approx 1.13 \hbar \omega_D e^{-\frac{1}{\rho(\epsilon_F)V_0}}.$$

Следи да $\frac{2\Delta}{k_B T_c} \approx 3.5$, у складу са експериментима на БКШ суперпроводницима.

(г) Што се тиче основног стања $|\Psi_0\rangle$ у Богољубов формализму очекујемо:

$$b_{\vec{k}\uparrow} |\Psi_0\rangle = 0.$$

Због $(u_k c_{\vec{k}\uparrow} - v_k c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger)(u_k + v_k c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger) |0\rangle = 0$,

закључујемо $|\Psi_0\rangle \equiv |\Psi_{BCS}\rangle = \prod_{\vec{k}} (u_k + v_k c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger) |0\rangle$.

Користећи фермионске релације добијамо и:

$$|\Psi_{BCS}\rangle = \prod_{\vec{k}} u_k e^{\sum_{\vec{k}} \frac{v_k}{u_k} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger} |0\rangle.$$

У координатној репрезентацији

$$\sum_{\vec{k}} \frac{v_k}{u_k} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger = \frac{1}{V} \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 \left(\sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} \frac{v_k}{u_k} \right) \Psi_\uparrow^\dagger(\vec{r}_1) \Psi_\downarrow^\dagger(\vec{r}_2).$$

Из овога можемо да закључимо да таласна функција, за фиксиран број честица N , се може приказати као антисиметризована колекција парова:

$$\Psi_{BCS} \sim \sum_{\sigma \in S_N} \text{sgn } \sigma \{ g(\vec{r}_{\sigma(1)} - \vec{r}_{\sigma(2)}) \chi_{\sigma(1),\sigma(2)} \cdots g(\vec{r}_{\sigma(N-1)} - \vec{r}_{\sigma(N)}) \chi_{\sigma(N-1),\sigma(N)} \}$$

где таласна функција једног пара електрона је $g(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} \frac{v_k}{u_k}$ и $\chi_{\sigma(i),\sigma(j)}$ описује спински део пара. Али у БКШ случају $g(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ не описује

Куперов пар, јер удео Куперових парова у укупном броју електрона је мали и нису сви електрони упарени како нам горња таласна функција сугерише. У БКШ теорији корелатор:

$$\langle \Psi_{\downarrow}(\vec{r}_1) \Psi_{\uparrow}(\vec{r}_2) \rangle \sim \sum_{\vec{k}} u_k v_k e^{-i\vec{k}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)},$$

има највећи допринос из региона у близини Ферми енергије и описује Куперов пар у случају БКШ суперпроводника са карактеристичном дужином кохеренције.