

# **Molekularfeldtheorie von Molekülkondensaten**

**Diplomarbeit von  
Wieland Ronalter**

**Hauptgutachter: Prof. Dr. Dr. h.c. Robert Graham  
Zweitgutachter: Dr. habil. Axel Pelster**



**vorgelegt dem  
Fachbereich Physik der  
Universität Duisburg Essen  
am 20. Dezember 2005**

*Hiermit versichere ich, daß ich die vorliegende Arbeit selbstständig und nur unter Zuhilfenahme der angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe.*

Essen, den 20.12.2005

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einführung</b>	<b>5</b>
<b>2</b>	<b>Molekularfeldnäherung</b>	<b>9</b>
2.1	Physikalisches Modell . . . . .	9
2.2	Hubbard-Stratonovich-Transformation . . . . .	11
2.3	Effektive Wirkung . . . . .	14
2.4	Molekularfeldnäherung . . . . .	15
2.4.1	Erzeugendes Funktional . . . . .	17
2.4.2	Homogenes System . . . . .	18
2.4.3	Effektives Potential . . . . .	23
2.4.4	Matsubara-Reihe . . . . .	24
2.5	Molekularfeld-Gleichungen . . . . .	26
2.5.1	Molekularfeldgleichungen in einheitenloser Darstellung . . . . .	27
2.5.2	Kritische Temperatur für schwache Wechselwirkung . . . . .	29
2.5.3	Kritische Temperatur im Grenzfall starker Kopplung . . . . .	32
2.5.4	Auswertung am absoluten Temperaturnullpunkt . . . . .	35
<b>3</b>	<b>Feshbach-Resonanz</b>	<b>41</b>
3.1	Grundlagen . . . . .	41
3.1.1	Einführung . . . . .	41
3.1.2	Streulösungen des Potentials . . . . .	43
3.1.3	Gebundene Lösungen des Kastenpotentials . . . . .	45
3.1.4	Resonanzstreuung am Kastenpotential . . . . .	46
3.2	Modell der Feshbachresonanz . . . . .	48

<b>4</b>	<b>Ausblick</b>	<b>55</b>
<b>A</b>	<b>Grassmann-Felder</b>	<b>57</b>
A.1	Grassmann-Variablen . . . . .	57
A.2	Analytische Resultate über Grassmann-Felder . . . . .	64
<b>B</b>	<b>Hubbard-Stratonovich-Transformation</b>	<b>67</b>
B.1	Physikalisches Modell . . . . .	67
B.2	Transformation bei reellen Integralen . . . . .	68
B.3	Sattelpunktsnäherung . . . . .	69
B.4	Schwachkopplungsreihe . . . . .	71
B.5	Starkkopplungsreihe . . . . .	73
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>78</b>

# Kapitel 1

## Einführung

In dieser Diplomarbeit wird ein Modell der Bose-Kondensation von Molekülen aus fermionischen Atomen behandelt. Wir betrachten dazu ein Vielteilchensystem, das über zwei Spin-Freiheitsgrade verfügt. Dies entspricht der aktuellen experimentellen Realisierung der Molekülkondensation, da durch Radio-Frequenz-Übergänge die Fermionen in zwei Hyperfein-spin-Zuständen präpariert werden, um darüber die Feshbach-Resonanzstelle festzulegen. Die Bildung der Moleküle erreicht man experimentell, indem man eine Feshbach-Resonanz der zugrundeliegenden Atome durchfährt. Eine Beschreibung der experimentellen Methodik zur Erzeugung von Molekülkondensaten findet sich in (??). Die Streulänge der Atome in verschiedenen Spinzuständen ist dann von Außen vorgegeben, mit Hilfe eines Magnetfeldes, das an die Spins koppelt. Die dazu proportional wachsende Kopplungsstärke ermöglicht schließlich die Paarung der Fermionen zu einem Komposit-Boson. Die zusammengesetzten Moleküle können natürlich den Grundzustand gemeinsam besetzen.

Beobachtet wurde die Feshbach-Resonanz zuerst an bosonischen Kondensaten im Jahr 1998 [2], drei Jahre nach der ersten experimentellen Realisierung eines Kondensates [3–5]. Seitdem steht die Bose-Kondensation im Fokus des wissenschaftlichen Interesses. Viele weitere theoretische und experimentelle Arbeiten sind im Anschluß daran veröffentlicht worden, da man nun über ein quantenmechanisches Modellsystem verfügt, an dem man die Effekte der Vielteilchenphysik unter verschiedenen Bedingungen studieren und überprüfen kann. Denn neben den ersten Kondensaten aus Rubidium, Natrium und Lithium sind weitere Atome kondensiert worden: Wasserstoff [6], Helium [7,8], Kalium [9], Cäsium [10], Ytterbium [11] und Chrom [12]. Zu diesen Bosonen gesellen sich Molekülkondensate mit fermionischen Kalium- und Lithium-Isotopen [13,14], sowie einige Moleküle aus bosonischen Atomen. Für das fermionische Kalium-Molekülkondensat wurde neben der Streulänge [15] auch die Molekülzahl und Bindungsenergie [16] gemessen. Die vergleichsweise späte Beobachtung dieser Molekülkondensation hängt natürlich mit dem fermionischen Charakter der Atome zusammen. da aufgrund des Pauli-Prinzips bei einfacher evaporativer Kühlung keine Rethermalisierung der verbleibenden Atome eintritt. Die Zwei-Körper-Stöße bei den niedrigen Temperaturen sind zum größten Teil durch die s-Wellenstreuung bestimmt, die für die Fermionen verboten ist. Dies umgeht man, indem man zweikomponentige Gase benutzt oder den p-

Wellenstreuquerschnitt durch äußere elektrische Felder erhöht. Ein spezifisches Problem für Lithium stellt die große Breite einige Feshbach-Resonanzen dar. Beim Überqueren derselben ist der Verlust durch Erhitzung besonders groß, so daß man andere Hyperfein-Zustände präpariert [17]. Die Präparierung der Hyperfein-Zustände und damit der Resonanzstelle ist dagegen trotz des ständigen Wechsels zwischen optischen und magnetischen Fallen sowie der Kühlung ein handhabbares Problem.

Wir behandeln ein Ensemble von wechselwirkenden Fermionen in Molekularfeldnäherung. Die Spin-1/2-Teilchen wechselwirken über ein attraktives Kontaktpotential. In Kapitel [2] entwickeln wir aus dem physikalischen Modell, die gesuchten Gleichungen für den Ordnungsparameter und das chemische Potential. Kapitel [3] beschreibt die Feshbach-Resonanz, indem wir ein einfaches Modell der Kopplung eines gebundenen Zustandes mit einer Streulösung berechnen. Dann kann die Energie der beiden Zustände über den Zeemann-Effekt gegeneinander verschoben werden.

Zu Anfang stellen wir mit dem Hamilton-Operator die Wirkung des Systems auf. Um von der quantenmechanischen zur statistischen Beschreibung zu gelangen, Wick-rotieren wir die Wirkung und erhalten die Imaginärzeitamplitude. Diese stimmt mit der großkanonischen Zustandssumme überein, wenn das chemische Potential vom Hamilton-Operator subtrahiert wird. Die Funktionalintegrale über die Fermi-Felder sind dann auszuwerten. Das Pauli-Prinzip fordert aber, daß die Felder antikommutieren, also können wir sicher nicht komplexe Zahlen verwenden, um die Integrale auszuwerten. Daher formulieren wir die Felder im Rahmen der Grassmann-Variablen bzw. deren unendlich dimensional Verallgemeinerung, den Grassmann-Feldern, einer Beschreibung, die auf Berezin [18] zurückgeht. Die mathematischen Grundlagen und Schlußfolgerungen im Hinblick auf die Berechnung der Funktionalintegrale werden eingehend im Anhang [A] dargelegt. Da wir in der Wirkung durch die Kontaktwechselwirkung einen quartischen Term in den Fermi-Feldern haben, ist die Zustandssumme noch nicht direkt auswertbar. Aber mittels einer Hubbard-Stratonovich-Transformation überführen wir die Wirkung in eine quadratische Feld-Abhängigkeit, nun aber zusätzlich über ein weiteres bosonisches Hilfsfeld. Die Leistungsfähigkeit dieses Formalismus wird im Anhang [B] an einem einfachen, physikalischen Beispiel demonstriert. Am Beispiel der klassischen Statistik des drehungsinvarianten quartischen Potentials zeigen wir die Nichtperturbativität dieser Transformation, d.h. die abgeleiteten Ergebnisse sind für alle Kopplungsstärken näherungsweise gültig.

Wir koppeln die fermionischen Felder zu anomalen Dichten, um die Molekülbildung zu beschreiben, wir paaren also nicht zwei komplex konjugierte Felder, sondern zwei Felder mit entgegengesetztem Spin. Nun können wir die Integration über die Grassmann-Felder ausführen und werten im Anschluß die effektive Wirkung aus, die noch von der Funktionalintegration über die Hilfsfelder abhängt. Um die Molekularfeldgleichungen zu erhalten, reicht es in der Schleifenentwicklung, das Baumgraphen-Niveau der effektiven Wirkung mitzunehmen. Die Lückengleichung ergibt sich aus dem Verschwinden der ersten Variation der effektiven Wirkung, da in der Hintergrundfeld-Methode die Beiträge, die linear in den Fluktuationen sind, verschwinden. Die Differentiation der effektiven Wirkung nach dem chemischen Potential

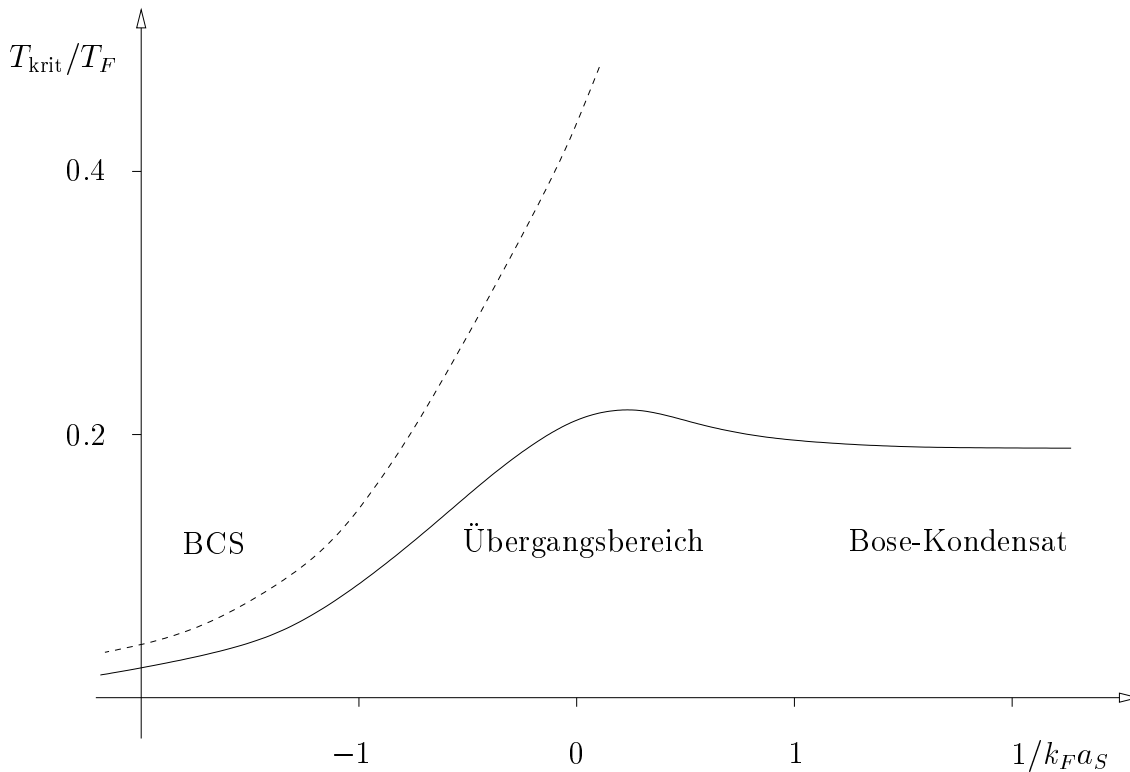


Abbildung 1.1: Qualitatives Bild der kritischen Temperatur abhängig von der Streulänge bei Berücksichtigung der Fluktuationsbeiträge. Entnommen der Veröffentlichung von Randeria et al. [19].

ergibt die Teilchengleichung. Diese beiden Gleichungen werten wir im Stromformalismus aus. Man erhält dann die Lücken- und Teilchengleichung aus den Autokorrelationsfunktionen. Diese entwickeln wir für das homogene Gas und erhalten so die beiden Bestimmungsgleichungen für das chemische Potential und das Molekularfeld, unserem Ordnungsparameter, der den Phasenübergang von der Hochtemperatur- zur Tieftemperaturphasen charakterisiert. Um die kritische Temperatur  $T_{\text{krit}}$  zu erhalten, berechnen wir die beiden Integrale für verschwindendes Molekularfeld. Das qualitative Ergebnis ist in Abbildung 1.1 dargestellt, in der die Abhängigkeit der der kritischen Temperatur von der s-Wellenstreulänge gezeigt wird. Im Grenzfall schwacher Kopplung liegt die BCS-Supraleitung vor. Der Limes großer Kopplungsstärke ist die Kondensation der vorgeformten Cooper-Paare. Die beiden fermionischen Atome bilden ein bosonisches Molekül, daß unterhalb der durchgehenden Linie in ein Abbildung 1.1 Bose-Kondensat übergeht.

Der intermediäre Bereich der, sowie der Bereich starker Kopplung wird durch die Molekularfeldapproximation nicht korrekt wiedergegeben. Aber dieser Bereich ist für die Beschreibung der Hochtemperatur-Supraleitung von Interesse. Hier existiert ein komplexes Wechselspiel zwischen Fermionen und Bosonen, die als Komposit-Teilchen und kollektive thermische Anregungen vorliegen. Die kritische Temperatur hängt dann nicht nur vom individuellem Effekt des Aufbrechens der Cooper-Paare ab, wie in der BCS-Theorie, sondern auch von der kol-

lektiven Anregung. Aber diese wird nicht durch die Molekularfeldnäherung erfaßt, gerade hier versagt also unsere Approximation. Dies erkennt man deutlich anhand von Abb. 1.1, in der die gestrichelte Linie das Ergebnis der Molekularfeldtheorie darstellt, das nur für schwache Kopplung die kritische Temperatur richtig wiedergibt. Das Ergebnis großer Kopplungsstärken beschreibt lediglich die Mischung eines idealen Fermi- und Bose-Gases an der Schwelle zur Kondensation. Eine Diskussion des Modells der Hochtemperatur-Supraleitung vom Standpunkt der Vielteilchentheorie findet sich im Übersichtsartikel von Q. Chen et al. [20].

Der Übergang von einem supraleitendem Cooper-Paar zum suprafluidem Bose-Kondensat erfolgt stetig, was in dem Artikel von Schmitt-Rink herausgearbeitet worden ist [21]. Wir betrachten den Übergang am absoluten Temperaturnullpunkt in Molekularfeldnäherung. Für verdünnte Gase ist diese Approximation für alle Wechselwirkungsstärken hinreichend [21]. Wir lösen nun die Molekularfeldgleichungen in dieser Arbeit erstmals exakt, und ermitteln die Streulänge sowie das chemische Potential im Rahmen dieses theoretischen Modells. Anwendbar ist dieses Konzept bei Fermi-Kondensaten von Kalium-40 und Lithium-6, die zur Zeit Gegenstand intensiver experimenteller Forschung sind [13–17, 22–27].



# Kapitel 2

## Molekularfeldnäherung

Im folgenden Kapitel untersuchen wir ein Vielteilchensystem von wechselwirkenden Spin-1/2-Teilchen. Die Fermionen betrachten wir im großkanonischen Ensemble, das wir über Funktionalintegralen charakterisieren, eine grundlegende Einführung in diese Methodik der statistischen Beschreibung eines Ensembles findet sich in [28].

Nach Überführung der Funktionalintegrale mittels einer Hubbard-Stratonvich-Transformation, können wir die effektive Wirkung im Rahmen einer Sattelpunktsapproximation, dem Baumgraphen-Niveau, auswerten. Wir koppeln die fermionischen Felder im Bogoliubov-Kanal zu anomalen Dichten, um die Paarung zweier Spin-1/2-Teilchen zu einem bosonischem Molekül zu untersuchen. Die effektive Wirkung bestimmt die Molekularfeldgleichung, sowie die Einschränkung durch die konstante Teilchenzahl. Am Ende dieses Kapitels berechnen wir die Lösungen dieser beiden Gleichungen für den Fall des verschwindenden Molekularfeldes, unserem Ordnungsparameter, sowie für den absoluten Temperaturnullpunkt.

Die Auswertung dieses physikalischen Modells durch Funktionalintegrale findet sich schon in den beiden Arbeiten von Randeria [19,29]. Dort werden ebenfalls die Teilchenzahl- und Lückengleichung in Molekularfeldnäherung für die kritische Temperatur und am absoluten Temperaturnullpunkt, approximativ gelöst. Die Autoren dieser beiden Veröffentlichungen beziehen auch die Fluktuationsbeiträge in die Teilchenzahlgleichung mit ein, was in dieser Diplomarbeit nicht berechnet und berücksichtigt worden ist. Wir lösen die Gleichungen am Temperaturnullpunkt erstmal exakt, und überprüfen die Ergebnisse für die kritische Temperatur. Desweiteren bestimmen wir die kompletten Greenschen Funktionen des Systems in Molekularfeldapproximation, und zeigen, daß die Formulierung über das effektive Potential äquivalent der korrekten Auswertung der effektiven Wirkung ist.

### 2.1 Physikalisches Modell

Die Fermionen wechselwirken über eine Kontaktwechselwirkung, dabei können wir aufgrund des Pauli-Prinzips die Wechselwirkung zwischen zwei Spin- $\uparrow$ - bzw. zwei Spin- $\downarrow$ -Fermionen vernachlässigen und uns auf die Wechselwirkung zwischen den Spin- $\uparrow$ - und den Spin- $\downarrow$ -

Fermionen beschränken. Im großkanonischen Ensemble berechnet sich die Zustandssumme zu:

$$\mathcal{Z} = \oint \mathcal{D}\psi_{\downarrow}^* \oint \mathcal{D}\psi_{\uparrow}^* \oint \mathcal{D}\psi_{\downarrow} \oint \mathcal{D}\psi_{\uparrow} \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\mathcal{A}[\psi_{\downarrow}^*, \psi_{\uparrow}^*, \psi_{\downarrow}, \psi_{\uparrow}]\right). \quad (2.1)$$

Da wir es mit Fermionen zu tun haben, bezeichnen  $\psi_{\downarrow}^*(\mathbf{x}, \tau)$ ,  $\psi_{\uparrow}^*(\mathbf{x}, \tau)$ ,  $\psi_{\downarrow}(\mathbf{x}, \tau)$ ,  $\psi_{\uparrow}(\mathbf{x}, \tau)$  Grassmann-Felder. Für die Fermionen haben wir antiperiodische Randbedingungen zu fordern:  $\psi_{\sigma}(\mathbf{x}, 0) = -\psi_{\sigma}(\mathbf{x}, \hbar\beta)$  und  $\psi_{\sigma}^*(\mathbf{x}, 0) = -\psi_{\sigma}^*(\mathbf{x}, \hbar\beta)$  mit  $\sigma = \downarrow, \uparrow$ . Die Wirkung  $\mathcal{A}$  setzt sich additiv aus zwei unterschiedlichen Beiträgen zusammen:

$$\mathcal{A}[\psi_{\downarrow}^*, \psi_{\uparrow}^*, \psi_{\downarrow}, \psi_{\uparrow}] = \mathcal{A}^{(0)}[\psi_{\downarrow}^*, \psi_{\uparrow}^*, \psi_{\downarrow}, \psi_{\uparrow}] + \mathcal{A}^{(\text{int})}[\psi_{\downarrow}^*, \psi_{\uparrow}^*, \psi_{\downarrow}, \psi_{\uparrow}]. \quad (2.2)$$

Sie beinhaltet zum einem die Ein-Teilchen-Wirkung:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^{(0)}[\psi_{\downarrow}^*, \psi_{\uparrow}^*, \psi_{\downarrow}, \psi_{\uparrow}] &= \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \left[ \psi_{\uparrow}^*(\mathbf{x}, \tau) \left( \hbar \frac{\partial}{\partial \tau} + \hat{\mathcal{H}} - \mu \right) \psi_{\uparrow}(\mathbf{x}, \tau) \right. \\ &\quad \left. + \psi_{\downarrow}^*(\mathbf{x}, \tau) \left( \hbar \frac{\partial}{\partial \tau} + \hat{\mathcal{H}} - \mu \right) \psi_{\downarrow}(\mathbf{x}, \tau) \right]. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Hierbei bezeichnet  $\hat{\mathcal{H}}$  den Einteilchen-Hamiltonoperator mit einem externen Potential:

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{x}). \quad (2.4)$$

Zum anderen beschreiben wir die Kontaktwechselwirkung zwischen Spin- $\downarrow$ - und Spin- $\uparrow$ -Fermionen durch:

$$\mathcal{A}^{(\text{int})}[\psi_{\downarrow}^*, \psi_{\uparrow}^*, \psi_{\downarrow}, \psi_{\uparrow}] = -g \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \psi_{\uparrow}^*(\mathbf{x}, \tau) \psi_{\downarrow}^*(\mathbf{x}, \tau) \psi_{\downarrow}(\mathbf{x}, \tau) \psi_{\uparrow}(\mathbf{x}, \tau). \quad (2.5)$$

Hierbei wählen wir für die Kopplungskonstante  $g > 0$ , so daß eine anziehende Wechselwirkung für positive Werte von  $g$  vorliegt. Die Stärke der Anziehung zwischen zwei Fermionen mit Spin  $\uparrow$  und  $\downarrow$  wächst dann mit  $g$ . Für  $g \downarrow 0$  liegt eine schwache Bindung vor, wir erwarten BCS-artige Paare von Fermionen. Dagegen erwarten wir für  $g \rightarrow \infty$  stark gebundene Moleküle aus Fermionen, die einer Bose-Kondensation unterliegen können.

Nun führen wir formal  $d$  verschiedene Grassmann-Felder ein, die wir über die 2-Teilchen-Wechselwirkung aneinanderkoppeln, so daß sich die großkanonische Zustandssumme schreiben läßt als:

$$\mathcal{Z} = \left\{ \prod_{k=1}^d \oint \mathcal{D}\psi_{\downarrow,k}^* \oint \mathcal{D}\psi_{\uparrow,k}^* \oint \mathcal{D}\psi_{\downarrow,k} \oint \mathcal{D}\psi_{\uparrow,k} \right\} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \left[ \sum_{\substack{j=1 \\ \sigma=\downarrow,\uparrow}}^d \right. \right. \quad (2.6)$$

$$\left. \left. \psi_{\sigma,j}^*(\mathbf{x}, \tau) \left( \hbar \frac{\partial}{\partial \tau} + \hat{\mathcal{H}} - \mu \right) \psi_{\sigma,j}(\mathbf{x}, \tau) - g \sum_{l,j=1}^d [\psi_{\downarrow,l}(\mathbf{x}, \tau) \psi_{\uparrow,l}(\mathbf{x}, \tau)]^\dagger \psi_{\downarrow,j}(\mathbf{x}, \tau) \psi_{\uparrow,j}(\mathbf{x}, \tau) \right] \right\}.$$

Dieses Vorgehen erlaubt uns, die Funktionalintegrale im Limes  $d \rightarrow \infty$  in Sattelpunktsnäherung auszuwerten. Um zum ursprünglichem physikalischem Modell zurückzukehren, müssen wir dann nur  $d = 1$  setzen.

## 2.2 Hubbard-Stratonovich-Transformation

Das Funktionalintegral (2.6) läßt sich durch den Wechselwirkungsterm vierter Ordnung in den Grassmann-Feldern nicht exakt auswerten. Aber eine Hubbard-Stratonovich-Transformation dieses Termes ermöglicht uns, die Funktionalintegration bezüglich der ursprünglichen Felder durchzuführen. Hierzu werden wir Anhang B folgen und Funktionalintegrale über bosonische Hilfsfelder  $\Delta^*(\mathbf{x}, \tau)$ ,  $\Delta(\mathbf{x}, \tau)$  einführen, so daß unsere Wechselwirkung nur noch quadratisch von den fermionischen Feldern abhängt. Diese fermionischen Funktionalintegrale lassen sich dann berechnen, und man erhält für die großkanonische Zustandssumme eine Darstellung, bei der die noch verbleibenden Funktionalintegrale über die bosonischen Hubbard-Stratonovich-Felder im Rahmen einer Sattelpunktsnäherung auszuwerten sind.

Mit Hilfe einer solchen Hubbard-Stratonovich-Transformation läßt sich der Wechselwirkungsanteil wie folgt schreiben:

$$\exp \left[ \frac{g}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \left( \sum_{i=1}^d \psi_{\downarrow,i}(\mathbf{x}, \tau) \psi_{\uparrow,i}(\mathbf{x}, \tau) \right)^\dagger \left( \sum_{l=1}^d \psi_{\downarrow,l}(\mathbf{x}, \tau) \psi_{\uparrow,l}(\mathbf{x}, \tau) \right) \right]$$

$$= \oint \mathcal{D}\Delta^* \oint \mathcal{D}\Delta \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \left[ \frac{\Delta^*(\mathbf{x}, \tau) \Delta(\mathbf{x}, \tau)}{g} \right. \right.$$

$$\left. \left. - \sum_{j=1}^d \Delta^*(\mathbf{x}, \tau) [\psi_{\downarrow,j}(\mathbf{x}, \tau) \psi_{\uparrow,j}(\mathbf{x}, \tau)] + [\psi_{\downarrow,j}(\mathbf{x}, \tau) \psi_{\uparrow,j}(\mathbf{x}, \tau)]^\dagger \Delta(\mathbf{x}, \tau) \right] \right\}. \quad (2.7)$$

Hierbei bezeichnen  $\Delta^*(\mathbf{x}, \tau)$ ,  $\Delta(\mathbf{x}, \tau)$  bosonische Hilfsfelder, für die die periodischen Randbedingungen  $\Delta^*(\mathbf{x}, 0) = \Delta^*(\mathbf{x}, \hbar\beta)$  und  $\Delta(\mathbf{x}, 0) = \Delta(\mathbf{x}, \hbar\beta)$  gefordert werden. Damit erhalten wir aus der Hubbard-Stratonovich-Transformation für  $\mathcal{Z}$  die Darstellung:

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z} &= \left\{ \prod_{j=1}^d \oint \mathcal{D}\psi_{\downarrow,j}^* \oint \mathcal{D}\psi_{\uparrow,j}^* \oint \mathcal{D}\psi_{\downarrow,j} \oint \mathcal{D}\psi_{\uparrow,j} \right\} \oint \mathcal{D}\Delta^* \oint \mathcal{D}\Delta \\
&\exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \left[ \frac{\Delta^*(\mathbf{x}, \tau)\Delta(\mathbf{x}, \tau)}{g} + \sum_{\substack{j=1 \\ \sigma=\downarrow,\uparrow}}^d \psi_{\sigma,j}^*(\mathbf{x}, \tau) \left( \hbar \frac{\partial}{\partial \tau} + \hat{\mathcal{H}} - \mu \right) \psi_{\sigma,j}(\mathbf{x}, \tau) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \sum_{j=1}^d \left( \Delta^*(\mathbf{x}, \tau) [\psi_{\downarrow,j}(\mathbf{x}, \tau)\psi_{\uparrow,j}(\mathbf{x}, \tau)] + [\psi_{\downarrow,j}(\mathbf{x}, \tau)\psi_{\uparrow,j}(\mathbf{x}, \tau)]^\dagger \Delta(\mathbf{x}, \tau) \right) \right] \right\}. \quad (2.8)
\end{aligned}$$

Wir schreiben die großkanonische Zustandssumme mittels Matrizen und Vektoren auf die kompaktere Nambu-Darstellung um:

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z} &= \oint \mathcal{D}\Delta^* \oint \mathcal{D}\Delta \exp \left( -\frac{1}{g\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \Delta^*(\mathbf{x}, \tau)\Delta(\mathbf{x}, \tau) \right) \\
&\quad \left\{ \prod_{j=1}^d \oint \mathcal{D}\psi_{\downarrow,j}^* \oint \mathcal{D}\psi_{\uparrow,j}^* \oint \mathcal{D}\psi_{\downarrow,j} \oint \mathcal{D}\psi_{\uparrow,j} \right\} \\
&\quad \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \eta^\dagger(\mathbf{x}, \tau) \mathbf{G}^{-1}(\mathbf{x}, \tau) \eta(\mathbf{x}, \tau) \right]. \quad (2.9)
\end{aligned}$$

Dabei sind die  $2d$ -komponentigen Vektoren  $\eta^\dagger(\mathbf{x}, \tau)$  und  $\eta(\mathbf{x}, \tau)$  definiert als

$$\eta^\dagger(\mathbf{x}, \tau) = \begin{pmatrix} \vdots \\ \psi_{\downarrow,j}(\mathbf{x}, \tau) \\ \psi_{\uparrow,j}^*(\mathbf{x}, \tau) \\ \vdots \end{pmatrix}^\dagger = (\dots, \psi_{\downarrow,j}^*(\mathbf{x}, \tau), \psi_{\uparrow,j}(\mathbf{x}, \tau), \dots) \quad (2.10)$$

und der Differentialoperator  $\mathbf{G}^{-1}(\mathbf{x}, \tau)$  ist diagonal in den  $d$ -Feldern:

$$\mathbf{G}_{kl}^{-1}(\mathbf{x}, \tau) = \bar{\mathbf{g}}^{-1}(\mathbf{x}, \tau) \delta_{kl} \quad (2.11)$$

mit der Matrix:

$$\bar{\mathbf{g}}^{-1}(\mathbf{x}, \tau) = \begin{pmatrix} \hbar \frac{\partial}{\partial \tau} + \hat{\mathcal{H}} - \mu & -\Delta(\mathbf{x}, \tau) \\ -\Delta^*(\mathbf{x}, \tau) & \hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \hat{\mathcal{H}} + \mu \end{pmatrix}. \quad (2.12)$$

Man beachte die Vorzeichen des Hamilton-Operators  $\hat{\mathcal{H}}$  und des chemischen Potentials  $\mu$  in (2.12). Sie kommen durch die Manipulation der ursprünglichen Lagrange-Dichte zustande, da wir die Differentialoperatoren stets nach rechts wirken lassen. Bei der Matrixdarstellung sind nun einige Umformungen erforderlich. Obwohl der Hamilton-Operator hermitesch ist, ändert er sein Vorzeichen, falls er auf das konjugierte Feld wirkt, denn wir lesen  $\hat{\mathcal{H}}$  weiter als nach rechts wirkenden Operator, müssen also die beiden Grassmann-Felder miteinander vertauschen. Entsprechend erfährt auch das chemische Potential  $\mu$  als  $c$ -Zahl einen Vorzeichenwechsel aufgrund der Grassmann-Algebra. Außerdem ist der Term  $\hbar\partial/\partial\tau$  partiell nach  $\tau$  zu integrieren, wobei wieder die Antikommutativität der Grassmann-Felder zu beachten ist. Das bedeutet aber, daß sich die beiden negativen Vorzeichen gegenseitig wegheben. Die entstehenden Randterme sind aufgrund der Antiperiodizität der Felder gleich groß, denn wegen  $\psi_{\sigma,i}(\mathbf{x}, 0) = -\psi_{\sigma,i}(\mathbf{x}, \hbar\beta)$  und  $\psi_{\sigma,i}^*(\mathbf{x}, 0) = -\psi_{\sigma,i}^*(\mathbf{x}, \hbar\beta)$  leisten sie keinen Beitrag zur Zustandssumme:

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \psi_{\sigma,j}^*(\mathbf{x}, \tau) \left[ \hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \psi_{\sigma,j}(\mathbf{x}, \tau) \right] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \psi_{\sigma,j}(\mathbf{x}, \tau) \left[ \hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \psi_{\sigma,j}^*(\mathbf{x}, \tau) \right].$$

Wir können in Gleichung (2.9) die Funktionalintegrale über die Grassmann-Felder berechnen, wie wir es im Anhang A über Grassmann-Felder für Gleichung (A.51) vorgeführt haben. Für die großkanonische Zustandssumme erhalten wir dann eine Darstellung, bei der lediglich die Funktionalintegrale über die bosonischen Hilfsfelder auftreten:

$$\mathcal{Z} = \oint \mathcal{D}\Delta^* \oint \mathcal{D}\Delta \exp \left( -\frac{d}{\hbar} \mathcal{A}[\Delta^*, \Delta] \right), \quad (2.13)$$

mit einer Wirkung der Form:

$$\mathcal{A}[\Delta^*, \Delta] = \frac{1}{\tilde{g}} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \Delta^*(\mathbf{x}, \tau) \Delta(\mathbf{x}, \tau) - \text{Splog } \bar{g}^{-1}[\Delta^*, \Delta]. \quad (2.14)$$

Hierbei ist  $\tilde{g}$  definiert als  $\tilde{g} = gd$ .

Man beachte, daß der Spurlogarithmus in (2.14) nur noch von  $\bar{g}^{-1}(\mathbf{x}, \tau)$  abhängt. Nach den Ergebnissen aus Anhang A ist der Spurlogarithmus zunächst über das gesamte  $G^{-1}(\mathbf{x}, \tau)$  zu berechnen. Da aber der Differentialoperator gemäß (2.11) in den  $d$  Feldern diagonal ist, ist der Spurlogarithmus von  $G^{-1}(\mathbf{x}, \tau)$  die Summe der Spurlogarithmen über  $\bar{g}^{-1}(\mathbf{x}, \tau)$ , also wird das Ergebnis für ein einzelnes Feld  $d$ -mal aufaddiert.

Dies führt zu dem bemerkenswerten Ergebnis, daß unsere resultierende Wirkung in (2.13) mit  $d$  linear anwächst. Wenn also die Anzahl der Felder über alle Grenzen wächst, dann wird auch unsere Wirkung beliebig groß. Dies bedeutet, daß in diesem Limes eine Sattelpunktsapproximation der Funktionalintegrale über die Hilfsfelder  $\Delta^*(\mathbf{x}, \tau)$ ,  $\Delta(\mathbf{x}, \tau)$  exakt wird (vgl. Anhang B).

## 2.3 Effektive Wirkung

Die Funktionalintegrale (2.13) über die bosonischen Felder führen wir im Rahmen der Methode der Hintergrundfelder aus [30]. Hierzu zerlegen wir die Hilfsfelder in Hintergrund- und Fluktuationsbeiträge:

$$\Delta(\mathbf{x}, \tau) = \Delta_0(\mathbf{x}, \tau) + \delta\Delta(\mathbf{x}, \tau), \quad \Delta^*(\mathbf{x}, \tau) = \Delta_0^*(\mathbf{x}, \tau) + \delta\Delta^*(\mathbf{x}, \tau). \quad (2.15)$$

Dies führt auf eine funktionale Taylor-Entwicklung der Wirkung  $\mathcal{A}[\Delta^*, \Delta]$  um die Hintergrundfelder  $\Delta_0^*(\mathbf{x}, \tau), \Delta_0(\mathbf{x}, \tau)$ :

$$\mathcal{A}[\Delta^*, \Delta] = \mathcal{A}[\Delta_0^*, \Delta_0] + \mathcal{A}^{(1)}[\delta\Delta^*, \delta\Delta] + \mathcal{A}^{(2)}[\delta\Delta^*, \delta\Delta] + \dots, \quad (2.16)$$

wobei

$$\mathcal{A}^{(1)}[\delta\Delta^*, \delta\Delta] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \sum_{\kappa=*,**} \frac{\delta\mathcal{A}[\Delta_0^*, \Delta_0]}{\delta\Delta_0^\kappa(\mathbf{x}, \tau)} \delta\Delta^\kappa(\mathbf{x}, \tau) \quad (2.17)$$

linear in den Fluktuationsfeldern ist. Analog dazu ist die zweite Ordnung der funktionalen Taylor-Entwicklung definiert:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^{(2)}[\delta\Delta^*, \delta\Delta] = & \quad (2.18) \\ \frac{1}{2} \sum_{\substack{\kappa=*,** \\ \lambda=*,**}} \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x' \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x & \frac{\delta^2 \mathcal{A}[\Delta_0^*, \Delta_0]}{\delta\Delta_0^\kappa(\mathbf{x}', \tau') \delta\Delta_0^\lambda(\mathbf{x}, \tau)} \delta\Delta^\lambda(\mathbf{x}, \tau) \delta\Delta^\kappa(\mathbf{x}', \tau'). \end{aligned}$$

Die hierbei auftretenden Funktionalableitungen der Wirkung (2.14) lauten:

$$\frac{\delta\mathcal{A}[\Delta_0^*, \Delta_0]}{\delta\Delta_0^*(\mathbf{x}, \tau)} = \frac{1}{\tilde{g}} \Delta_0(\mathbf{x}, \tau) - \frac{\delta\text{Splog } \bar{g}^{-1}[\Delta_0^*, \Delta_0]}{\delta\Delta_0^*(\mathbf{x}, \tau)} \quad (2.19)$$

$$\frac{\delta\mathcal{A}[\Delta_0^*, \Delta_0]}{\delta\Delta_0(\mathbf{x}, \tau)} = \frac{1}{\tilde{g}} \Delta_0^*(\mathbf{x}, \tau) - \frac{\delta\text{Splog } \bar{g}^{-1}[\Delta_0^*, \Delta_0]}{\delta\Delta_0(\mathbf{x}, \tau)} \quad (2.20)$$

$$\frac{\delta^2 \mathcal{A}[\Delta_0^*, \Delta_0]}{\delta\Delta_0^*(\mathbf{x}', \tau) \delta\Delta_0^*(\mathbf{x}, \tau)} = - \frac{\delta^2 \text{Splog } \bar{g}^{-1}[\Delta_0^*, \Delta_0]}{\delta\Delta_0^*(\mathbf{x}', \tau) \delta\Delta_0^*(\mathbf{x}, \tau)} \quad (2.21)$$

$$\frac{\delta^2 \mathcal{A}[\Delta_0^*, \Delta_0]}{\delta\Delta_0^*(\mathbf{x}', \tau) \delta\Delta_0(\mathbf{x}, \tau)} = \frac{1}{\tilde{g}} \delta^{(p)}(\tau - \tau') \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') - \frac{\delta^2 \text{Splog } \bar{g}^{-1}[\Delta_0^*, \Delta_0]}{\delta\Delta_0^*(\mathbf{x}', \tau) \delta\Delta_0(\mathbf{x}, \tau)} \quad (2.22)$$

$$\frac{\delta^2 \mathcal{A}[\Delta_0^*, \Delta_0]}{\delta\Delta_0(\mathbf{x}', \tau) \delta\Delta_0^*(\mathbf{x}, \tau)} = \frac{1}{\tilde{g}} \delta^{(p)}(\tau - \tau') \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') - \frac{\delta^2 \text{Splog } \bar{g}^{-1}[\Delta_0^*, \Delta_0]}{\delta\Delta_0(\mathbf{x}', \tau) \delta\Delta_0^*(\mathbf{x}, \tau)} \quad (2.23)$$

$$\frac{\delta^2 \mathcal{A}[\Delta_0^*, \Delta_0]}{\delta\Delta_0(\mathbf{x}', \tau) \delta\Delta_0(\mathbf{x}, \tau)} = - \frac{\delta^2 \text{Splog } \bar{g}^{-1}[\Delta_0^*, \Delta_0]}{\delta\Delta_0(\mathbf{x}', \tau) \delta\Delta_0(\mathbf{x}, \tau)} \quad (2.24)$$

und der periodisch repetierten Delta-Funktion:

$$\delta^{(p)}(\tau - \tau') = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \delta(\tau - \tau' + m\hbar\beta) \quad (2.25)$$

Beim Einsetzen von (2.16) in die großkanonische Zustandssumme (2.13) darf man im Rahmen der Hintergrundfeld-Methode die Beiträge (2.17) nicht berücksichtigen, die in den Fluktuationfeldern  $\delta\Delta^*(\mathbf{x}, \tau)$ ,  $\delta\Delta(\mathbf{x}, \tau)$  linear sind [30] Dadurch erhalten wir:

$$\mathcal{Z} = \exp\left(-\frac{d}{\hbar}\mathcal{A}[\Delta_0^*, \Delta_0]\right) \oint \mathcal{D}\delta\Delta^* \oint \mathcal{D}\delta\Delta \exp\left[-\frac{d}{\hbar}(\mathcal{A}^{(2)}[\delta\Delta^*, \delta\Delta] + \dots)\right]. \quad (2.26)$$

Für die effektive Wirkung

$$\mathcal{V}_{\text{eff}}[\Delta_0^*, \Delta_0] = -\frac{1}{\beta} \ln \mathcal{Z} \quad (2.27)$$

ergibt sich dadurch die Schleifenentwicklung

$$\mathcal{V}_{\text{eff}}[\Delta_0^*, \Delta_0] = \mathcal{V}_{\text{eff}}^{(0)}[\Delta_0^*, \Delta_0] + \mathcal{V}_{\text{eff}}^{(1)}[\Delta_0^*, \Delta_0] + \dots, \quad (2.28)$$

mit:

$$\mathcal{V}_{\text{eff}}^{(0)}[\Delta_0^*, \Delta_0] = \frac{d}{\beta\hbar}\mathcal{A}[\Delta_0^*, \Delta_0], \quad (2.29)$$

$$\mathcal{V}_{\text{eff}}^{(1)}[\Delta_0^*, \Delta_0] = -\frac{1}{\beta} \ln \left[ \oint \mathcal{D}\delta\Delta^* \oint \mathcal{D}\delta\Delta \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\mathcal{A}^{(2)}[\delta\Delta^*, \delta\Delta]\right) \right]. \quad (2.30)$$

In der Hintergrundfeld-Methode werden die Felder  $\Delta_0^*(\mathbf{x}, \tau)$ ,  $\Delta_0(\mathbf{x}, \tau)$  durch die funktionale Extremalisierung der effektiven Wirkung  $\mathcal{V}_{\text{eff}}[\Delta_0^*, \Delta_0]$  bestimmt:

$$\frac{\delta\mathcal{V}[\Delta_0^*, \Delta_0]}{\delta\Delta_0^*(\mathbf{x}, \tau)} = 0, \quad \frac{\delta\mathcal{V}[\Delta_0^*, \Delta_0]}{\delta\Delta_0(\mathbf{x}, \tau)} = 0. \quad (2.31)$$

## 2.4 Molekularfeldnäherung

In der Molekularfeldnäherung wird die Schleifenentwicklung (2.28) schon nach der nullten Ordnung, dem sogenannten Baumgraphen-Niveau, abgebrochen:

$$\mathcal{V}_{\text{eff}}[\Delta_0^*, \Delta_0] \approx \mathcal{V}_{\text{eff}}^{(0)}[\Delta_0^*, \Delta_0]. \quad (2.32)$$

Einsetzen von (2.14), (2.29), (2.32) in (2.31) führt auf die sogenannten Molekularfeldgleichungen für  $\Delta_0^*(\mathbf{x}, \tau)$ ,  $\Delta_0(\mathbf{x}, \tau)$ . Hierzu ist nach (2.19), (2.20) der Spurlogarithmus

$$\text{Splog } \bar{g}^{-1} = \hbar \ln \left\{ \oint \mathcal{D}\psi_{\downarrow}^* \oint \mathcal{D}\psi_{\uparrow}^* \oint \mathcal{D}\psi_{\downarrow} \oint \mathcal{D}\psi_{\uparrow} \exp \left( -\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}[\psi_{\downarrow}^*, \psi_{\uparrow}^*, \psi_{\downarrow}, \psi_{\uparrow}, \Delta_0^*, \Delta_0] \right) \right\} \quad (2.33)$$

mit der Wirkung

$$\mathcal{A}[\psi_{\downarrow}^*, \psi_{\uparrow}^*, \psi_{\downarrow}, \psi_{\uparrow}, \Delta_0^*, \Delta_0] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x (\psi_{\downarrow}^*(\mathbf{x}, \tau), \psi_{\uparrow}(\mathbf{x}, \tau)) \begin{pmatrix} \hbar \frac{\partial}{\partial \tau} + \hat{\mathcal{H}} - \mu & -\Delta_0(\mathbf{x}, \tau) \\ -\Delta_0^*(\mathbf{x}, \tau) & \hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \hat{\mathcal{H}} + \mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{\downarrow}(\mathbf{x}, \tau) \\ \psi_{\uparrow}^*(\mathbf{x}, \tau) \end{pmatrix} \quad (2.34)$$

nach den Hintergrundfeldern  $\Delta_0^*(\mathbf{x}, \tau)$ ,  $\Delta_0(\mathbf{x}, \tau)$  funktional zu differenzieren und wir erhalten:

$$\frac{1}{\bar{g}} \Delta_0(\mathbf{x}, \tau) - \langle \psi_{\downarrow}(\mathbf{x}, \tau) \psi_{\uparrow}(\mathbf{x}, \tau) \rangle = 0, \quad (2.35)$$

$$\frac{1}{\bar{g}} \Delta_0^*(\mathbf{x}, \tau) - \langle \psi_{\uparrow}^*(\mathbf{x}, \tau) \psi_{\downarrow}^*(\mathbf{x}, \tau) \rangle = 0. \quad (2.36)$$

Hierbei treten die Erwartungswerte

$$\langle \bullet \rangle = \frac{\oint \mathcal{D}\psi_{\downarrow}^* \oint \mathcal{D}\psi_{\uparrow}^* \oint \mathcal{D}\psi_{\downarrow} \oint \mathcal{D}\psi_{\uparrow} \bullet \exp \{ -\mathcal{A}[\psi_{\downarrow}^*, \psi_{\uparrow}^*, \psi_{\downarrow}, \psi_{\uparrow}, \Delta_0^*, \Delta_0] / \hbar \}}{\oint \mathcal{D}\psi_{\downarrow}^* \oint \mathcal{D}\psi_{\uparrow}^* \oint \mathcal{D}\psi_{\downarrow} \oint \mathcal{D}\psi_{\uparrow} \exp \{ -\mathcal{A}[\psi_{\downarrow}^*, \psi_{\uparrow}^*, \psi_{\downarrow}, \psi_{\uparrow}, \Delta_0^*, \Delta_0] / \hbar \}} \quad (2.37)$$

auf. Um die Teilchenzahl zu bestimmen, differenzieren wir das effektive Potential nach dem chemischen Potential:

$$N = - \left. \frac{\partial \mathcal{V}_{\text{eff}}[\Delta_0^*, \Delta_0]}{\partial \mu} \right|_{\beta, V}. \quad (2.38)$$

Wir werten diese Teilchenzahlgleichung wieder nur für das Baumgraphen-Niveau (2.32) aus und erhalten mit Hilfe von (2.14), (2.29), (2.33) und (2.34):

$$N = \frac{d}{\hbar\beta} \sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \langle \psi_{\sigma}^*(\mathbf{x}, \tau) \psi_{\sigma}(\mathbf{x}, \tau) \rangle. \quad (2.39)$$



### 2.4.1 Erzeugendes Funktional

Jetzt stellt sich die Aufgabe, die in (2.35), (2.36) und (2.39) auftretenden Korrelationsfunktionen zu berechnen. Dazu führen wir Grassmann-Stromfelder  $j_\sigma^*(\mathbf{x}, \tau)$ ,  $j_\sigma(\mathbf{x}, \tau)$  ein, die linear an die Grassmann-Felder  $\psi_\sigma^*(\mathbf{x}, \tau)$ ,  $\psi_\sigma(\mathbf{x}, \tau)$  mit  $\sigma = \uparrow, \downarrow$  koppeln, und betrachten das erzeugende Funktional:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}[\mathbf{j}^*, \mathbf{j}] &= \oint \mathcal{D}\psi_\downarrow^* \oint \mathcal{D}\psi_\uparrow^* \oint \mathcal{D}\psi_\downarrow \oint \mathcal{D}\psi_\uparrow \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}[\psi_\downarrow^*, \psi_\uparrow^*, \psi_\downarrow, \psi_\uparrow, \Delta_0^*, \Delta_0] \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} [\psi_\sigma^*(\mathbf{x}, \tau) j_\sigma(\mathbf{x}, \tau) + j_\sigma^*(\mathbf{x}, \tau) \psi_\sigma(\mathbf{x}, \tau)] \right\}. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Die Korrelationsfunktionen ergeben sich dann durch Funktionalableitungen nach den Stromfeldern:

$$\langle \psi_\sigma^\kappa(\mathbf{x}', \tau') \psi_\epsilon^\lambda(\mathbf{x}'', \tau'') \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}[\mathbf{j}^*, \mathbf{j}]} \frac{\hbar^2 \delta \mathcal{Z}[\mathbf{j}^*, \mathbf{j}]}{\delta j_\epsilon^{\lambda*}(\mathbf{x}'', \tau'') \delta j_\sigma^{\kappa*}(\mathbf{x}', \tau')} \Big|_{\mathbf{j}=0}^{\mathbf{j}^*=0} \quad (2.41)$$

für  $\epsilon, \sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}$  und  $\kappa, \lambda \in \{*, **\}$ . Mit Hilfe der 2-komponentigen Stromfelder

$$\mathbf{j}^\dagger(\mathbf{x}, \tau) = \begin{pmatrix} j_\downarrow(\mathbf{x}, \tau) \\ j_\uparrow^*(\mathbf{x}, \tau) \end{pmatrix}^\dagger = (j_\downarrow^*(\mathbf{x}, \tau), j_\uparrow(\mathbf{x}, \tau)) \quad (2.42)$$

erhalten wir für das Gaußsche Funktionalintegral (2.40):

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}[\mathbf{j}^*, \mathbf{j}] &= \mathcal{Z}[\mathbf{j}^* \equiv 0, \mathbf{j} \equiv 0] \\ &\times \exp \left( \frac{1}{\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int_0^{\hbar\beta} d\tau'' \int d^D x' \int d^D x'' \mathbf{j}^\dagger(\mathbf{x}', \tau') \bar{\mathbf{g}}(\mathbf{x}', \tau'; \mathbf{x}'', \tau'') \mathbf{j}(\mathbf{x}'', \tau'') \right). \end{aligned} \quad (2.43)$$

Dabei bestimmt sich die Greensche Funktion

$$\bar{\mathbf{g}}(\mathbf{x}', \tau'; \mathbf{x}'', \tau'') = \begin{pmatrix} \bar{g}_{11}(\mathbf{x}', \tau'; \mathbf{x}'', \tau'') & \bar{g}_{12}(\mathbf{x}', \tau'; \mathbf{x}'', \tau'') \\ \bar{g}_{21}(\mathbf{x}', \tau'; \mathbf{x}'', \tau'') & \bar{g}_{22}(\mathbf{x}', \tau'; \mathbf{x}'', \tau'') \end{pmatrix} \quad (2.44)$$

als funktionales Inverses des Differentialoperators

$$\bar{\mathbf{g}}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}'', \tau'') = \frac{1}{\hbar} \delta(\tau - \tau'') \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'') \bar{\mathbf{g}}^{-1}(\mathbf{x}, \tau), \quad (2.45)$$

d.h. es gilt

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau'' \int d^D x'' \bar{g}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}'', \tau'') \bar{g}(\mathbf{x}'', \tau''; \mathbf{x}', \tau') = \delta^{(a)}(\tau - \tau') \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \mathbb{E}. \quad (2.46)$$

Dabei stellt

$$\delta^{(a)}(\tau - \tau') = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} (-1)^m \delta(\tau - \tau' + m\hbar\beta) \quad (2.47)$$

die antiperiodisch repetierte Delta-Funktion dar, die die Matsubara-Zerlegung

$$\delta^{(a)}(\tau - \tau') = \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega_m(\tau - \tau')} \quad (2.48)$$

besitzt. Hierbei bezeichnen die  $\omega_m$  die fermionischen Matsubara-Frequenzen, die die Anti-periodizitätsbedingung an die Grassmann-Felder sicherstellen.

$$\omega_m = \frac{(2m+1)\pi}{\hbar\beta} \quad (2.49)$$

Die in (2.35), (2.36) und (2.39) auftretenden Auto-Korrelationsfunktionen berechnen sich dann mit Hilfe der Greensche Funktionen (2.44) unter Berücksichtigung der Zeitordnung:

$$\langle \psi_{\downarrow}(\mathbf{x}, \tau) \psi_{\downarrow}^*(\mathbf{x}, \tau) \rangle = \lim_{\tau' \downarrow \tau} \bar{g}_{11}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}, \tau'), \quad (2.50)$$

$$\langle \psi_{\downarrow}(\mathbf{x}, \tau) \psi_{\uparrow}(\mathbf{x}, \tau) \rangle = \lim_{\tau' \downarrow \tau} \bar{g}_{12}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}, \tau'), \quad (2.51)$$

$$\langle \psi_{\uparrow}^*(\mathbf{x}, \tau) \psi_{\downarrow}(\mathbf{x}, \tau) \rangle = \lim_{\tau' \downarrow \tau} \bar{g}_{21}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}, \tau'), \quad (2.52)$$

$$\langle \psi_{\uparrow}^*(\mathbf{x}, \tau) \psi_{\uparrow}(\mathbf{x}, \tau) \rangle = \lim_{\tau' \downarrow \tau} \bar{g}_{22}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}, \tau'). \quad (2.53)$$

## 2.4.2 Homogenes System

In diesem Abschnitt betrachten wir ein homogenes Fermi-Gas von Spin-1/2-Teilchen, so daß das Potential  $V(\mathbf{x})$  verschwindet. Die daraus resultierende Homogenität des Gesamtsystems bezüglich des Ortes  $\mathbf{x}$  und der Imaginärzeit  $\tau$  überträgt sich auf die Hintergrundfelder, da diese dann als konstant angenommen werden können:

$$\Delta_0^*(\mathbf{x}, \tau) = \Delta_0^*, \quad \Delta_0(\mathbf{x}, \tau) = \Delta_0. \quad (2.54)$$

Daher läßt sich sowohl die Greensche Funktion  $\bar{g}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau')$  als auch der Differentialoperator  $\bar{g}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau')$  einer Fourier-Matsubara-Transformation unterwerfen:

$$\bar{g}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{(2\pi)^D} \int d^D k e^{i\omega_m(\tau-\tau')} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} \bar{g}(\mathbf{k}, m), \quad (2.55)$$

$$\bar{g}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{(2\pi)^D} \int d^D k e^{i\omega_m(\tau-\tau')} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} \bar{g}^{-1}(\mathbf{k}, m). \quad (2.56)$$

Damit reduziert sich die Identität (2.46) unter Berücksichtigung von (2.12), (2.45) und (2.54) auf:

$$\begin{pmatrix} -i\hbar\omega_m + E(\mathbf{k}) - \mu & -\Delta_0 \\ -\Delta_0^* & -i\hbar\omega_m - E(\mathbf{k}) + \mu \end{pmatrix} \bar{g}(\mathbf{k}, m) = \frac{1}{\beta} \mathbb{E}. \quad (2.57)$$

Die Fourier-Matsubara-Transformierte der Greenschen Funktion ergibt sich dann zu:

$$\bar{g}(\mathbf{k}, m) = \frac{\begin{pmatrix} i\hbar\omega_m + E(\mathbf{k}) - \mu & -\Delta_0 \\ -\Delta_0^* & i\hbar\omega_m - E(\mathbf{k}) + \mu \end{pmatrix}}{\beta [\Delta_0^* \Delta_0 + \hbar^2 \omega_m^2 + (E(\mathbf{k}) - \mu)^2]}. \quad (2.58)$$

Die Pole dieser Greenschen Funktion besitzen zudem eine physikalische Deutung. An diesen Stellen verschwindet der Nenner unserer Greenschen Funktion, dann liest man aber gerade das Einteilchenanregungsspektrum ab. Wobei das Hintergrundfeld eine Energielücke darstellt, das also eine Mindestenergie aufgebracht werden muß, um die Teilchen in einen angeregten Zustand zu bringen. Einsetzen von (2.58) in (2.55) führt auf Matsubara-Reihen, die von der folgenden Form sind:

$$s_1(b, \tau) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \frac{e^{i\omega_m \tau}}{b + \hbar^2 \omega_m^2}, \quad (2.59)$$

$$s_2(b, \tau) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \frac{-i\hbar\omega_m e^{i\omega_m \tau}}{b + \hbar^2 \omega_m^2}. \quad (2.60)$$

Um diese beiden Reihen aufzusummieren benötigen wir die Fourier-Entwicklung der Kammfunktion. Aufgrund der Periodizität dieser Funktion, läßt sich diese in eine Fourier-Reihe entwickeln

$$\sum_{m=-\infty}^{+\infty} \delta(x-m) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} a_n e^{-2\pi n x i} \quad (2.61)$$

mit den Fourier-Koeffizienten

$$a_n = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int_{-1/2}^{+1/2} dx \delta(x-m) e^{2\pi n x i} = \int_{-1/2}^{+1/2} dx \delta(x) e^{2\pi n x i} = 1. \quad (2.62)$$

Wir erhalten nun die folgende nützliche Distributionen-Identität:

$$\sum_{m=-\infty}^{+\infty} \delta(y-m) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-2\pi n y i}. \quad (2.63)$$

Für die fermionischen Matsubara-Frequenzen (2.49) ist  $m = (\hbar\beta\omega_m - \pi)/2\pi$ , so daß sich aus der Distributionen-Identität (2.63) die Poissonsche Summenformel für Fermionen ergibt:

$$\sum_{m=-\infty}^{+\infty} f(\omega_m) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{\hbar\beta}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega f(\omega) e^{-n\hbar\beta\omega i + n\pi i}. \quad (2.64)$$

Also hat die Reihe (2.59) die Darstellung:

$$s_1(b, \tau) = \frac{\beta}{2\pi} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} (-1)^n \int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{\omega} \frac{e^{-in\bar{\omega}(\beta-\tau/\hbar)}}{b + \bar{\omega}^2}. \quad (2.65)$$

Das dabei auftretende  $\omega$ -Integral ist mit Hilfe des Residuen-Satzes berechenbar, und wir erhalten:

$$s_1(b, \tau) = \frac{\beta}{2\sqrt{b}} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{\sqrt{b}}{\hbar} |\hbar\beta n - \tau|\right). \quad (2.66)$$

Diese Reihe ist unter der Nebenbedingung  $\tau \in [0, \hbar\beta]$  auszuwerten, wobei die Summanden  $n = 0$ ,  $n < 0$  und  $n > 0$  getrennt zu behandeln sind:

$$s_1(b, \tau) = \frac{\beta}{2\sqrt{b}} \left\{ \exp\left[-\frac{\sqrt{b}}{\hbar} |\tau|\right] + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \left[ \exp\left(-\frac{\sqrt{b}}{\hbar} (\tau + n\hbar\beta)\right) + \exp\left(\frac{\sqrt{b}}{\hbar} (\tau - n\hbar\beta)\right) \right] \right\}. \quad (2.67)$$

Dabei lassen sich beide Reihen über die geometrischen Reihe berechnen, und wir erhalten insgesamt:

$$s_1(b, \tau) = \frac{\beta \sinh \left[ \frac{\sqrt{b}}{\hbar} \left( |\tau| - \frac{\hbar\beta}{2} \right) \right]}{2\sqrt{b} \cosh \left( \frac{\beta\sqrt{b}}{2} \right)}, \quad (2.68)$$

$$s_2(b, \tau) = -\hbar \frac{\partial s_1(b, \tau)}{\partial \tau}. \quad (2.69)$$

Für die Reihe (2.60) haben wir (2.59) zu differenzieren, so daß sich  $s_2(b, \tau)$  aus (2.68) berechnen läßt:

$$s_2(b, \tau) = -\frac{\tau}{|\tau|} \frac{\beta \cosh \left[ \frac{\sqrt{b}}{\hbar} \left( |\tau| - \frac{\hbar\beta}{2} \right) \right]}{2 \cosh \left( \frac{\beta\sqrt{b}}{2} \right)}. \quad (2.70)$$

Die aus (2.55) und (2.58) folgende Greensche Funktion stellen wir nun mit Hilfe der in (2.68), (2.70) berechneten Matsubara-Reihen (2.59), (2.60) folgendermaßen dar:

$$\bar{g}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = \frac{1}{2(2\pi)^D} \int d^D k \frac{\begin{pmatrix} \bar{g}_{11}(\mathbf{k}; \tau - \tau') & \bar{g}_{12}(\mathbf{k}; \tau - \tau') \\ \bar{g}_{21}(\mathbf{k}; \tau - \tau') & \bar{g}_{22}(\mathbf{k}; \tau - \tau') \end{pmatrix}}{\cosh \left( \frac{\beta}{2} \sqrt{\Delta_0^* \Delta_0 + (E(\mathbf{k}) - \mu)^2} \right)} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')}. \quad (2.71)$$

Hierbei sind die einzelnen Funktionen  $\bar{g}_{ij}(\mathbf{k}, \tau)$  gegeben durch:

$$\begin{aligned} \bar{g}_{11}(\mathbf{k}; \tau - \tau') &= \frac{\tau' - \tau}{|\tau - \tau'|} \cosh \left[ \frac{\sqrt{\Delta_0^* \Delta_0 + (E(\mathbf{k}) - \mu)^2}}{\hbar} \left( |\tau - \tau'| - \frac{\hbar\beta}{2} \right) \right] \\ &\quad + \frac{E(\mathbf{k}) - \mu}{\sqrt{\Delta_0^* \Delta_0 + (E(\mathbf{k}) - \mu)^2}} \sinh \left[ \frac{\sqrt{\Delta_0^* \Delta_0 + (E(\mathbf{k}) - \mu)^2}}{\hbar} \left( |\tau - \tau'| - \frac{\hbar\beta}{2} \right) \right], \\ \bar{g}_{12}(\mathbf{k}; \tau - \tau') &= \frac{-\Delta}{\sqrt{\Delta_0^* \Delta_0 + (E(\mathbf{k}) - \mu)^2}} \sinh \left[ \frac{\sqrt{\Delta_0^* \Delta_0 + (E(\mathbf{k}) - \mu)^2}}{\hbar} \left( |\tau - \tau'| - \frac{\hbar\beta}{2} \right) \right], \\ \bar{g}_{21}(\mathbf{k}; \tau - \tau') &= \frac{-\Delta^*}{\sqrt{\Delta_0^* \Delta_0 + (E(\mathbf{k}) - \mu)^2}} \sinh \left[ \frac{\sqrt{\Delta_0^* \Delta_0 + (E(\mathbf{k}) - \mu)^2}}{\hbar} \left( |\tau - \tau'| - \frac{\hbar\beta}{2} \right) \right], \\ \bar{g}_{22}(\mathbf{k}; \tau - \tau') &= \frac{\tau' - \tau}{|\tau - \tau'|} \cosh \left[ \frac{\sqrt{\Delta_0^* \Delta_0 + (E(\mathbf{k}) - \mu)^2}}{\hbar} \left( |\tau - \tau'| - \frac{\hbar\beta}{2} \right) \right] \\ &\quad - \frac{E(\mathbf{k}) - \mu}{\sqrt{\Delta_0^* \Delta_0 + (E(\mathbf{k}) - \mu)^2}} \sinh \left[ \frac{\sqrt{\Delta_0^* \Delta_0 + (E(\mathbf{k}) - \mu)^2}}{\hbar} \left( |\tau - \tau'| - \frac{\hbar\beta}{2} \right) \right]. \end{aligned}$$

Nun bilden wir die Autokorrelationsfunktionen:

$$\bar{g}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}, \tau') = \begin{pmatrix} \langle \psi_{\downarrow}(\mathbf{x}, \tau) \psi_{\downarrow}^*(\mathbf{x}, \tau) \rangle & \langle \psi_{\downarrow}(\mathbf{x}, \tau) \psi_{\uparrow}(\mathbf{x}, \tau) \rangle \\ \langle \psi_{\uparrow}^*(\mathbf{x}, \tau) \psi_{\downarrow}^*(\mathbf{x}, \tau) \rangle & \langle \psi_{\uparrow}^*(\mathbf{x}, \tau) \psi_{\uparrow}(\mathbf{x}, \tau) \rangle \end{pmatrix} \quad (2.72)$$

unter Berücksichtigung der Zeitordnung gemäß

$$\bar{g}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}, \tau) = \lim_{\tau' \downarrow \tau} \bar{g}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}, \tau') \quad (2.73)$$

und erhalten

$$\lim_{\tau' \downarrow \tau} \bar{g}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}, \tau') = \frac{1}{2(2\pi)^D} \int d^D k \frac{\begin{pmatrix} \bar{g}_{11}(\mathbf{k}, \Delta_0^*, \Delta_0) & \bar{g}_{12}(\mathbf{k}, \Delta_0^*, \Delta_0) \\ \bar{g}_{21}(\mathbf{k}, \Delta_0^*, \Delta_0) & \bar{g}_{22}(\mathbf{k}, \Delta_0^*, \Delta_0) \end{pmatrix}}{\sqrt{\Delta_0^* \Delta_0 + (E(\mathbf{k}) - \mu)^2}}. \quad (2.74)$$

Hierbei stellen sich die Matrixelemente dar, als:

$$\begin{aligned} \bar{g}_{11}(\mathbf{k}, \Delta_0^*, \Delta_0) &= \sqrt{\Delta_0^* \Delta_0 + (E(\mathbf{k}) - \mu)^2} \\ &\quad - (E(\mathbf{k}) - \mu) \tanh \left( \frac{\beta}{2} \sqrt{\Delta_0^* \Delta_0 + (E(\mathbf{k}) - \mu)^2} \right), \end{aligned} \quad (2.75)$$

$$\bar{g}_{12}(\mathbf{k}, \Delta_0^*, \Delta_0) = \Delta_0 \tanh \left( \frac{\beta}{2} \sqrt{\Delta_0^* \Delta_0 + (E(\mathbf{k}) - \mu)^2} \right), \quad (2.76)$$

$$\bar{g}_{21}(\mathbf{k}, \Delta_0^*, \Delta_0) = \Delta_0^* \tanh \left( \frac{\beta}{2} \sqrt{\Delta_0^* \Delta_0 + (E(\mathbf{k}) - \mu)^2} \right), \quad (2.77)$$

$$\begin{aligned} \bar{g}_{22}(\mathbf{k}, \Delta_0^*, \Delta_0) &= \sqrt{\Delta_0^* \Delta_0 + (E(\mathbf{k}) - \mu)^2} \\ &\quad + (E(\mathbf{k}) - \mu) \tanh \left( \frac{\beta}{2} \sqrt{\Delta_0^* \Delta_0 + (E(\mathbf{k}) - \mu)^2} \right). \end{aligned} \quad (2.78)$$

Damit verfügen wir durch die Gleichungen (2.35), (2.36) über Bestimmungsgleichungen für die Hintergrundfelder  $\Delta_0^*, \Delta_0$  wobei wir die Definition  $\tilde{g} = gd$  zu berücksichtigen haben. Wir erhalten entweder

$$\frac{1}{g} = \frac{d}{2(2\pi)^D} \int d^D k \frac{\tanh \left( \frac{\beta}{2} \sqrt{\Delta_0^* \Delta_0 + (E(\mathbf{k}) - \mu)^2} \right)}{\sqrt{\Delta_0^* \Delta_0 + (E(\mathbf{k}) - \mu)^2}} \quad (2.79)$$

oder

Spin-1/2-Teilchen

$$\Delta_0^* = 0 = \Delta_0. \quad (2.80)$$

Außerdem ist gemäß (2.39) die Teilchendichte  $n = N/V$  festgelegt durch

$$n = -\frac{d}{(2\pi)^D} \int d^D k (E(\mathbf{k}) - \mu) \frac{\tanh\left(\frac{\beta}{2} \sqrt{\Delta_0^* \Delta_0 + (E(\mathbf{k}) - \mu)^2}\right)}{\sqrt{\Delta_0^* \Delta_0 + (E(\mathbf{k}) - \mu)^2}} \quad (2.81)$$

Damit haben wir für unser physikalisches Modellsystem zwei Phasen gefunden. In der einen Phase verschwinden die Hintergrundfelder  $\Delta_0^*, \Delta_0$ , so daß (2.80), (2.81) die Temperaturabhängigkeit des chemischen Potentials beschreibt. In der anderen Phase ist die Temperaturabhängigkeit der Hintergrundfelder und des chemischen Potentials  $\mu$  durch (2.79) und (2.81) bestimmt. Das Hintergrundfeld ist unser Ordnungsparameter in dieser Phase. Er stellt die Paarwellenfunktion des Fermi-Gases dar. Für schwache Kopplung beschreibt er also die Bildung von Cooper-Paaren, wie in einem Tieftemperatursupraleiter.

### 2.4.3 Effektives Potential

Wir werden nun die Molekularfeldgleichung (2.79) und die Teilchendichte (2.81) auf eine zweite Weise ableiten, um zu zeigen, daß das effektive Potential und die korrekte Berechnung der effektive Wirkung im Rahmen dieser Theorie identische Ergebnisse liefern. Der Unterschied zwischen den beiden Rechnungen liegt in der Auswertung der effektiven Wirkung. Bei der korrekten Auswertung der effektiven Wirkung müssen wir die kompletten Greenschen Funktionen mit erzeugenden Funktionalen herleiten, um diese dann auszuwerten. Bei dem effektiven Potential haben wir nur die effektive Wirkung an den festen Hintergrundfeldern auszuwerten, wobei diese dann nur noch als Variablen in der effektiven Wirkung auftauchen. So daß wir den Spurlogarithmus direkt berechnen können. Hierzu berechnen wir das effektive Potential als Baumgraphen-Niveau (2.29), (2.32) mit (2.14) unter der Berücksichtigung der Homogenität des Systems. Aufgrund der Hintergrundfelder (2.54) erhalten wir:

$$\mathcal{V}_{\text{eff}}[\Delta_0^*, \Delta_0] = \frac{V}{g} \Delta_0^* \Delta_0 - \frac{1}{\beta} \text{Sp} \log \bar{g}^{-1}(\Delta_0^*, \Delta_0), \quad (2.82)$$

mit einem Differentialoperator (2.12), (2.45) der Form:

$$\bar{g}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = \frac{1}{\hbar} \delta(\tau - \tau') \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \begin{pmatrix} \hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \mu & -\Delta_0 \\ -\Delta_0^* & \hbar \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \mu \end{pmatrix}. \quad (2.83)$$

Der Spurlogarithmus dieses Differentialoperators ist nun definiert als

$$\text{Splog } \bar{g}^{-1}(\Delta_0^*, \Delta_0) = \frac{V}{(2\pi)^D} \sum_{j=1}^2 \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int d^D k \ln \lambda_{\mathbf{k},m}^{(j)}, \quad (2.84)$$

wobei sich die Eigenwerte  $\lambda_{\mathbf{k},m}^{(j)}$  durch die Lösung des Eigenwertproblems

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x' \bar{g}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') \begin{pmatrix} \psi_{\downarrow, \mathbf{k}, m}^{(j)}(\mathbf{x}', \tau') \\ \psi_{\uparrow, \mathbf{k}, m}^{(j)}(\mathbf{x}', \tau') \end{pmatrix} = \lambda_{\mathbf{k}, m}^{(j)} \begin{pmatrix} \psi_{\downarrow, \mathbf{k}, m}^{(j)}(\mathbf{x}, \tau) \\ \psi_{\uparrow, \mathbf{k}, m}^{(j)}(\mathbf{x}, \tau) \end{pmatrix} \quad (2.85)$$

ergeben. Aus (2.83) lesen wir unmittelbar ab:

$$\lambda_{\mathbf{k}, m}^{(1)} \cdot \lambda_{\mathbf{k}, m}^{(2)} = - [\hbar^2 \omega_m^2 + (E(\mathbf{k}) - \mu)^2 + \Delta_0^* \Delta_0], \quad (2.86)$$

so daß sich das effektive Potential (2.82) ergibt zu

$$\mathcal{V}_{\text{eff}} = \frac{V}{g} \Delta_0^* \Delta_0 - \frac{Vd}{\beta(2\pi)^D} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int d^D k \ln (-\hbar^2 \omega_m^2 - (E(\mathbf{k}) - \mu)^2 - \Delta_0^* \Delta_0). \quad (2.87)$$

Nun berechnen wir die Matsubara-Summe mit Hilfe der Identität

$$\begin{aligned} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \ln(-\hbar^2 \omega_m^2 - b) &= \sum_{m=-\infty}^{+\infty} [\ln(\hbar^2 \omega_m^2 + b) + i\pi] \\ &= \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \ln(\hbar^2 \omega_m^2 + b) + i\pi \left(1 + 2 \sum_{m=1}^{\infty} 1\right) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \ln(\hbar^2 \omega_m^2 + b) + i\pi (1 + 2\zeta(0)). \end{aligned} \quad (2.88)$$

Da für die Zeta-Funktion gilt  $\zeta(0) = -1/2$  [31, S. 1102], verschwindet der Imaginärteil der Matsubara-Summe. Wir erhalten schließlich:

$$\mathcal{V}_{\text{eff}}^{(0)}[\Delta_0^*, \Delta_0] = \frac{V}{g} \left\{ \Delta_0^* \Delta_0 - \frac{2gd}{(2\pi)^D} \int d^D k \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2\beta} \ln[\hbar^2 \omega_m^2 + b] \right\}. \quad (2.89)$$

#### 2.4.4 Matsubara-Reihe

Wir zeigen nun, daß die Auswertung der Matsubara-Reihe (2.89) auf das folgende Ergebnis führt:



$$\mathcal{V}_{\text{eff}}^{(0)}[\Delta_0^*, \Delta_0] = \frac{V}{g} \left\{ \Delta_0^* \Delta_0 - \frac{2gd}{\beta(2\pi)^D} \int d^D k \ln \left[ 2 \cosh \left( \frac{\beta}{2} \sqrt{b} \right) \right] \right\}. \quad (2.90)$$

Dazu wenden wir die Poissonsche Formel für Fermionen (2.64) an:

$$s_3(b) = -\frac{1}{2\beta} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \ln(\hbar^2 \omega_m^2 + b) = -\frac{1}{4\pi} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{in\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\nu \ln(\hbar^2 \nu^2 + b) e^{-i\nu\beta n}. \quad (2.91)$$

Das Integral (2.91) läßt sich dadurch berechnen, daß wir

$$-\frac{d}{dy} (a^{-y}) \Big|_{y=0} = \ln a \quad (2.92)$$

und die Schwinger-Identität [31, S.884]

$$a^{-y} = \frac{1}{\Gamma(y)} \int_0^\infty d\kappa \kappa^{y-1} e^{-\kappa a}, \quad y > 0 \quad (2.93)$$

verwenden:

$$s_3(b) = \frac{1}{4\pi} \frac{d}{dy} \left[ \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{e^{in\pi}}{\Gamma(y)} \int_0^\infty d\kappa \kappa^{y-1} e^{-\kappa E_k^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\nu e^{-\nu^2 \kappa - i\nu\beta n} \right] \Big|_{y=0}. \quad (2.94)$$

Die Auswertung des Gauß-Integrales ergibt

$$s_3(b) = \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \frac{d}{dy} \left[ \frac{1}{\Gamma(y)} \int_0^\infty d\kappa \kappa^{y-\frac{3}{2}} e^{-\kappa b} \left( 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} e^{in\pi} e^{-\frac{n^2 \beta^2}{4\kappa}} \right) \right] \Big|_{y=0}, \quad (2.95)$$

und das Integral aus Gleichung (2.95) findet sich in [31, S. 360]:

$$s_3(b) = \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \frac{d}{dy} \left[ \frac{\Gamma(y - \frac{1}{2})}{\Gamma(y)} (b)^{\frac{1}{2}-y} + \frac{4}{\Gamma(y)} \sum_{n=1}^{\infty} e^{in\pi} \left( \frac{n^2 \beta^2}{4b} \right)^{\frac{2y-1}{4}} K_{y-\frac{1}{2}}(n\beta\sqrt{b}) \right] \Big|_{y=0}. \quad (2.96)$$

Hierbei bezeichnet  $K_\lambda(z)$  die modifizierte Bessel-Funktion mit der Eigenschaft:

$$K_{\pm\frac{1}{2}}(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} e^{-z}. \quad (2.97)$$

Bei der Differentiation von Gleichung (2.96) ist zu beachten, daß alle Faktoren bis auf die Gamma-Funktion  $\Gamma(y)$  an der Stelle  $y = 0$  beschränkt sind. Da die Gamma-Funktion die Laurent-Entwicklung [31, S.885]

$$\Gamma(y) = \frac{1}{y} + \sum_{k=0}^{\infty} c_{k+1} y^k \quad (2.98)$$

besitzt, ergibt sich aus (2.96)

$$s_3(b) = -\frac{1}{2} \left[ \sqrt{b} - 2 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{e^{n\beta\sqrt{b}}}{n\beta} \right], \quad (2.99)$$

so daß wir insgesamt erhalten

$$s_3(b) = -\frac{1}{\beta} \ln \left[ 2 \cosh \left( \frac{\beta\sqrt{b}}{2} \right) \right]. \quad (2.100)$$

## 2.5 Molekularfeld-Gleichungen

Die effektive Wirkung (2.90) wird nun bezüglich  $\Delta_0$  und  $\Delta_0^*$  extremalisiert. In (2.90) tritt nur das Produkt  $\Delta_0^* \Delta_0$  auf, d.h. eine Ableitung nach  $\Delta_0^*$  ist dasselbe wie nach  $\Delta_0^* \Delta_0$  zu differenzieren und dann mit  $\Delta_0$  zu multiplizieren:

$$\frac{\partial \mathcal{V}_{\text{eff}}^{(0)}}{\partial \Delta_0^*} = \Delta_0 \frac{\partial \mathcal{V}_{\text{eff}}^{(0)}}{\partial (\Delta_0^* \Delta_0)}, \quad \frac{\partial \mathcal{V}_{\text{eff}}^{(0)}}{\partial \Delta_0} = \Delta_0^* \frac{\partial \mathcal{V}_{\text{eff}}^{(0)}}{\partial (\Delta_0^* \Delta_0)}. \quad (2.101)$$

Dadurch erhalten wir den trivialen Sattelpunkt (2.80) und die Molekularfeldgleichungen (2.79) werten wir die effektive Wirkung am Extremum  $\Delta_0^*, \Delta_0$  aus, so erhalten wir die großkanonische freie Energie. Die Teilchendichte ergibt sich aus der Thermodynamik gemäß:

$$n = -\frac{1}{V} \left( \frac{\partial \mathcal{V}_{\text{eff}}^{(0)}}{\partial \mu} \right) \Big|_{\beta, V}. \quad (2.102)$$

Einsetzen von (2.90) in (2.102) reproduziert schließlich (2.81).

### 2.5.1 Molekularfeldgleichungen in einheitenloser Darstellung

Die beiden Integrale (2.79) und (2.81) sind UV-divergent, d.h. sie konvergieren nicht, solange nicht der Beitrag der kleinen Wellenlängen abgezogen wird. Dazu subtrahieren wir die führende Ordnung der Integranden im Limes  $|\mathbf{k}| \rightarrow \infty$  und erhalten

$$\frac{1}{g} = \frac{d}{2(2\pi)^D} \int d^D k \left( \frac{\tanh\left(\frac{\beta}{2}\sqrt{\Delta_0^* \Delta_0 + (E(\mathbf{k}) - \mu)^2}\right)}{\sqrt{\Delta_0^* \Delta_0 + (E(\mathbf{k}) - \mu)^2}} - \frac{1}{E(\mathbf{k})} \right), \quad (2.103)$$

sowie

$$n = \frac{d}{(2\pi)^D} \int d^D k \left( 1 - (E(\mathbf{k}) - \mu) \frac{\tanh\left(\frac{\beta}{2}\sqrt{\Delta_0^* \Delta_0 + (E(\mathbf{k}) - \mu)^2}\right)}{\sqrt{\Delta_0^* \Delta_0 + (E(\mathbf{k}) - \mu)^2}} \right). \quad (2.104)$$

Nun können wir beginnen, die beiden Integrale explizit auszuwerten. Die  $\mathbf{k}$ -Abhängigkeit der Energie ist in unserem Fall aufgrund des fehlenden äußeren Potential, die der freien Teilchen:  $E(\mathbf{k}) = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m$ . Somit sind die beide Integrale im  $\mathbf{k}$ -Raum kugelsymmetrisch. Durch den Koordinatenwechsel und eine anschließende Substitution führen wir das  $D$ -dimensionale Integral auf ein eindimensionales Energie-Integral zurückzuführen. Wir erhalten erst einen zusätzlichen Faktor  $k^{D-1}$  im Integranden und multiplizieren die Gleichungen einfach mit der  $D$ -dimensionalen Kugeloberfläche  $\mathcal{O}_D = 2\sqrt{\pi}^D / \Gamma(D/2)$ , die der Integration über die Winkel entstammt.

Als zweiten Schritt substituieren wir in den Integralen  $k$  durch eine neue Variable  $\bar{\epsilon}$  mit  $k^2 = \bar{\epsilon} 2m / \hbar^2$ :

$$\frac{1}{\tilde{g}} = \frac{1}{2\Gamma(\frac{D}{2})} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar^2}}^D \int_0^\infty d\bar{\epsilon} \left( \frac{\tanh\left(\frac{\beta}{2}\sqrt{\Delta_0^* \Delta_0 + (\bar{\epsilon} - \mu)^2}\right)}{\sqrt{\Delta_0^* \Delta_0 + (\bar{\epsilon} - \mu)^2}} - \frac{1}{\bar{\epsilon}} \right) \sqrt{\bar{\epsilon}}^{D-2}. \quad (2.105)$$

Für die Teilchenzahlgleichung erhält man:

$$n = \frac{d}{\Gamma(\frac{D}{2})} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar^2}}^D \int_0^\infty d\bar{\epsilon} \left( 1 - (\bar{\epsilon} - \mu) \frac{\tanh\left(\frac{\beta}{2}\sqrt{\Delta_0^* \Delta_0 + (\bar{\epsilon} - \mu)^2}\right)}{\sqrt{\Delta_0^* \Delta_0 + (\bar{\epsilon} - \mu)^2}} \right) \sqrt{\bar{\epsilon}}^{D-2}. \quad (2.106)$$

Die Gleichungen (2.105) und (2.106) bringen wir auf natürliche Einheiten, in dem wir  $\bar{\epsilon}, \mu, \beta, \Delta_0^*$  und  $\Delta_0$  durch die Fermi-Energie  $\epsilon_F$  teilen, und definieren:

$$\tilde{\epsilon} = \frac{\bar{\epsilon}}{\epsilon_F}, \quad \tilde{\mu} = \frac{\mu}{\epsilon_F}, \quad \tilde{\beta} = \epsilon_F \beta, \quad \tilde{\Delta}_0^* = \frac{\Delta_0^*}{\epsilon_F}, \quad \tilde{\Delta}_0 = \frac{\Delta_0}{\epsilon_F}. \quad (2.107)$$

Dann erhalten wir mit der Fermi-Energie:

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\sqrt{4\pi}^D}{2} \Gamma\left(\frac{D}{2} + 1\right) n \right]^{2/D} \quad (2.108)$$

und für die Gleichungen (2.105), (2.106):

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tilde{g}} &= \frac{\sqrt{\epsilon_F}^{D-2}}{2\Gamma(\frac{D}{2})} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar^2}} \int_0^\infty d\tilde{\epsilon} \left( \frac{\tanh\left(\frac{\tilde{\beta}}{2} \sqrt{\tilde{\Delta}_0^* \tilde{\Delta}_0 + (\tilde{\epsilon} - \tilde{\mu})^2}\right)}{\sqrt{\tilde{\Delta}_0^* \tilde{\Delta}_0 + (\tilde{\epsilon} - \tilde{\mu})^2}} - \frac{1}{\tilde{\epsilon}} \right) \sqrt{\tilde{\epsilon}}^{D-2} \\ &= -\frac{mk_F^{D-2}}{\sqrt{4\pi}^D \hbar^2 \Gamma(\frac{D}{2})} \int_0^\infty d\tilde{\epsilon} \left( \frac{1}{\tilde{\epsilon}} - \frac{\tanh\left(\frac{\tilde{\beta}}{2} \sqrt{\tilde{\Delta}_0^* \tilde{\Delta}_0 + (\tilde{\epsilon} - \tilde{\mu})^2}\right)}{\sqrt{\tilde{\Delta}_0^* \tilde{\Delta}_0 + (\tilde{\epsilon} - \tilde{\mu})^2}} \right) \sqrt{\tilde{\epsilon}}^{D-2}, \end{aligned} \quad (2.109)$$

$$\begin{aligned} n &= \frac{\sqrt{\epsilon_F}^D d}{\Gamma(\frac{D}{2})} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar^2}} \int_0^\infty d\tilde{\epsilon} \left( 1 - (\tilde{\epsilon} - \tilde{\mu}) \frac{\tanh\left(\frac{\tilde{\beta}}{2} \sqrt{\tilde{\Delta}_0^* \tilde{\Delta}_0 + (\tilde{\epsilon} - \tilde{\mu})^2}\right)}{\sqrt{\tilde{\Delta}_0^* \tilde{\Delta}_0 + (\tilde{\epsilon} - \tilde{\mu})^2}} \right) \sqrt{\tilde{\epsilon}}^{D-2} \\ &= \frac{nDd}{4} \int_0^\infty d\tilde{\epsilon} \left( 1 - (\tilde{\epsilon} - \tilde{\mu}) \frac{\tanh\left(\frac{\tilde{\beta}}{2} \sqrt{\tilde{\Delta}_0^* \tilde{\Delta}_0 + (\tilde{\epsilon} - \tilde{\mu})^2}\right)}{\sqrt{\tilde{\Delta}_0^* \tilde{\Delta}_0 + (\tilde{\epsilon} - \tilde{\mu})^2}} \right) \sqrt{\tilde{\epsilon}}^{D-2}. \end{aligned} \quad (2.110)$$

Diese beiden Gleichungen wollen wir nun für die physikalischen Felder in drei Dimensionen auswerten. Dazu haben wir erstens  $d = 1$  und  $D = 3$  zu setzen, sowie eine Beziehung zwischen der Kopplungskonstanten und der Streulänge  $a_s$  zu nutzen, denn  $a_s = -mg/4\pi\hbar^2$ . Das negative Vorzeichen kommt aufgrund unserer Vorzeichenwahl der Kopplungskonstanten zustande, wir haben ja für attraktive Wechselwirkungen positives Vorzeichen gefordert. Das überführt die Gleichungen (2.109), (2.110) in:

$$\frac{1}{a_s k_F} = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\tilde{\epsilon} \left( \frac{1}{\tilde{\epsilon}} - \frac{\tanh\left(\frac{\tilde{\beta}}{2} \sqrt{\tilde{\Delta}_0^* \tilde{\Delta}_0 + (\tilde{\epsilon} - \tilde{\mu})^2}\right)}{\sqrt{\tilde{\Delta}_0^* \tilde{\Delta}_0 + (\tilde{\epsilon} - \tilde{\mu})^2}} \right) \sqrt{\tilde{\epsilon}} \quad (2.111)$$

$$\frac{4}{3} = \int_0^\infty d\tilde{\epsilon} \left( 1 - (\tilde{\epsilon} - \tilde{\mu}) \frac{\tanh\left(\frac{\tilde{\beta}}{2} \sqrt{\tilde{\Delta}_0^* \tilde{\Delta}_0 + (\tilde{\epsilon} - \tilde{\mu})^2}\right)}{\sqrt{\tilde{\Delta}_0^* \tilde{\Delta}_0 + (\tilde{\epsilon} - \tilde{\mu})^2}} \right) \sqrt{\tilde{\epsilon}}. \quad (2.112)$$

Nun substituieren wir erneut:

$$\frac{\bar{\beta}}{2}\tilde{\epsilon} = \epsilon, \quad \frac{\bar{\beta}}{2}\tilde{\mu} = \bar{\mu}, \quad \frac{\bar{\beta}}{2}\tilde{\Delta}_0^* = \bar{\Delta}_0^*, \quad \frac{\bar{\beta}}{2}\tilde{\Delta}_0 = \bar{\Delta}_0, \quad (2.113)$$

so daß sich für die Gleichungen (2.111) und (2.112) ergibt:

$$\frac{\pi}{2a_s k_F} = \frac{1}{\sqrt{2\bar{\beta}}} \int_0^\infty d\epsilon \left( \frac{1}{\epsilon} - \frac{\tanh\left(\sqrt{\bar{\Delta}_0^* \bar{\Delta}_0 + (\epsilon - \bar{\mu})^2}\right)}{\sqrt{\bar{\Delta}_0^* \bar{\Delta}_0 + (\epsilon - \bar{\mu})^2}} \right) \sqrt{\epsilon} \quad (2.114)$$

$$\sqrt{\bar{\beta}}^3 = \frac{3}{\sqrt{2}} \int_0^\infty d\epsilon \left( 1 - (\epsilon - \bar{\mu}) \frac{\tanh\left(\sqrt{\bar{\Delta}_0^* \bar{\Delta}_0 + (\epsilon - \bar{\mu})^2}\right)}{\sqrt{\bar{\Delta}_0^* \bar{\Delta}_0 + (\epsilon - \bar{\mu})^2}} \right) \sqrt{\epsilon}. \quad (2.115)$$

Diese Integrale sind gleichzeitig auszuwerten, das ist aber nur noch in speziellen Fällen möglich.

## 2.5.2 Kritische Temperatur für schwache Wechselwirkung

Wir betrachten als erstes den trivialen Sattelpunkt  $\bar{\Delta}_0^* = 0, \bar{\Delta}_0 = 0$ . Dort verschwinden die Wurzel­ausdrücke in den hyperbolischen Funktionen der Gleichungen (2.114), (2.115), dabei hat man Gleichung (2.114) um den Term

$$\int_0^\infty d\epsilon \sqrt{\epsilon} \frac{\tanh(\epsilon - \bar{\mu})}{\epsilon} \quad (2.116)$$

zu ergänzen und die Terme, die  $\tanh(\epsilon - \bar{\mu})$  enthalten, partiell zu integrieren. Damit ergeben sich die folgenden Gleichungen:

$$\begin{aligned} \frac{\pi}{2a_s k_F} &= \lim_{w \rightarrow \infty} \left\{ \sqrt{\frac{2\epsilon}{\bar{\beta}}} [1 - \tanh(\epsilon - \bar{\mu})]_{\epsilon=0}^{\epsilon=w} \right\} + \frac{1}{\sqrt{2\bar{\beta}}} \left[ 2 \int_0^\infty d\epsilon \frac{\sqrt{\epsilon}}{\cosh^2(\epsilon - \bar{\mu})} \right. \\ &\quad \left. - \bar{\mu} \int_0^\infty d\epsilon \frac{\tanh(\epsilon - \bar{\mu})}{\sqrt{\epsilon}(\epsilon - \bar{\mu})} \right] \end{aligned} \quad (2.117)$$

$$\beta^{3/2} = \lim_{w \rightarrow \infty} \left\{ \sqrt{2}\sqrt{\epsilon}^3 [1 - \tanh(\epsilon - \bar{\mu})]_{\epsilon=0}^{\epsilon=w} \right\} + \sqrt{2} \int_0^\infty d\epsilon \frac{\sqrt{\epsilon}^3}{\cosh^2(\epsilon - \bar{\mu})}. \quad (2.118)$$

Die ausintegrierten Anteile verschwinden bei der Limesbildung, damit haben wir nur noch die verbleibenden Integrale zu berechnen. Der letzte Summand in (2.117) ist ebenfalls partiell zu integrieren, wobei wir uns die Heavyside-Funktion definieren als:

$$\vartheta(y) = \begin{cases} 1 & ; y > 0 \\ 0 & ; \text{sonst} \end{cases} . \quad (2.119)$$

Nach Ausführung der Integration erhalten wir:

$$\frac{\pi}{2a_s k_F} = \sqrt{\frac{2}{\beta}} \left\{ \int_0^\infty d\epsilon \frac{\sqrt{\epsilon} - \sqrt{|\bar{\mu}|} \left[ \vartheta(-\bar{\mu}) \arctan \left( \sqrt{\frac{\epsilon}{|\bar{\mu}|}} \right) + \vartheta(\bar{\mu}) \frac{1}{2} \ln \left| \frac{\sqrt{\epsilon} + \sqrt{|\bar{\mu}|}}{\sqrt{\epsilon} - \sqrt{|\bar{\mu}|}} \right| \right]}{\cosh^2(\epsilon - \bar{\mu})} \right\} + \pi \vartheta(-\bar{\mu}) \sqrt{\frac{\bar{\mu}}{2\beta}}. \quad (2.120)$$

In Gleichung (2.120) substituieren wir  $\epsilon = |\bar{\mu}|x$  und  $\varpi = \bar{\mu}/|\bar{\mu}|$ , so schreibt sich (2.120) um zu:

$$\frac{\pi}{2a_s k_F} = \sqrt{\frac{2|\bar{\mu}|}{\beta}} \left\{ |\bar{\mu}| \int_0^\infty dx \frac{\sqrt{x}}{\cosh^2 [|\bar{\mu}|(x - \varpi)]} - |\bar{\mu}| \vartheta(-\varpi) \int_0^\infty dx \frac{\arctan(x)}{\cosh^2 [|\bar{\mu}|(x + 1)]} + \frac{\pi}{2} \vartheta(-\varpi) - \vartheta(\varpi) |\bar{\mu}| \int_0^\infty dx \frac{\ln |\sqrt{x} + 1|}{\cosh^2 [|\bar{\mu}|(x - 1)]} + \vartheta(\varpi) \frac{|\bar{\mu}|}{2} \int_0^\infty dx \frac{\ln |x - 1|}{\cosh^2 [|\bar{\mu}|(x - 1)]} \right\}.$$

Für Gleichung (2.118) ergibt sich:

$$\sqrt{\bar{\beta}}^3 = \sqrt{2} \sqrt{|\bar{\mu}|}^5 \int_0^\infty dx \frac{\sqrt{x}^3}{\cosh^2 [|\bar{\mu}|(x - \varpi)]}. \quad (2.121)$$

Diese Integrale werden nun von uns weiter ausgewertet, indem wir annehmen, daß  $|\bar{\mu}| \gg 1$  ist, was eine Forderung an die Temperatur darstellt. Die Temperatur des betrachteten Fermi-Gases muß klein gegen die Fermi-Temperatur sein. Das bedeutet, daß sich fast alle Teilchen im Grundzustand befinden, so daß eine Anwendung der Molekularfeldgleichungen durchaus gerechtfertigt ist. Dann kann man die Dirac-Familieneigenschaft der Integranden über den hyperbolischen Kosinus nutzen, denn für große  $|\bar{\mu}|$  konvergiert

$$\frac{|\bar{\mu}|}{2 \cosh^2 [|\bar{\mu}|(x - \varpi)]} \quad (2.122)$$

gegen die Diracsche Delta-Distribution  $\delta(x - \varpi)$ . Damit bestimmt sich  $\beta$  und  $\pi/2a_s k_F$  im Fall  $\bar{\mu} > 0$  zu:

$$\sqrt{\bar{\beta}}^3 = \sqrt{2\bar{\mu}}^3 \quad (2.123)$$

$$\begin{aligned} \frac{\pi}{2a_s k_F} &= \sqrt{\frac{2\bar{\mu}}{\beta}} \left\{ 2 - 2 \ln 2 - \left[ \frac{1 + \tanh \bar{\mu}}{2} \ln \bar{\mu} \right] + \frac{1}{2} \int_{-\bar{\mu}}^\infty dy \frac{\ln |y|}{\cosh^2 |y|} \right\} \\ &\approx 2 - 2 \ln 2 - \ln \bar{\mu} + \int_0^{+\infty} dy \frac{\ln y}{\cosh^2 y} \\ &= 2 - 2 \ln 2 - \ln \bar{\mu} + \ln \pi - 2 \ln 2 - C, \end{aligned} \quad (2.124)$$

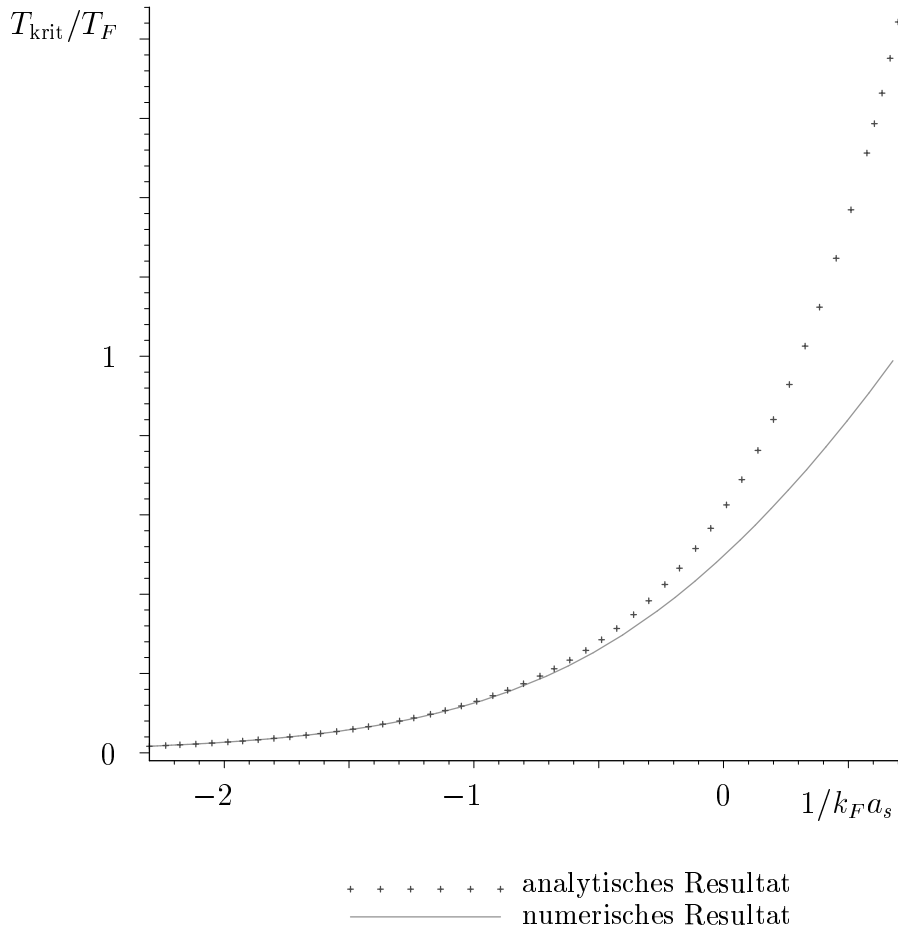


Abbildung 2.1: Abhängigkeit der kritischen Temperatur von der s-Wellenstreuungslänge (verschwindendes Molekularfeld).

wobei  $C$  die Eulersche Konstante, mit dem Zahlenwert  $C = 0,577215\dots$  ist, und man das Integral in [31, S. 895, S. 574] findet. Aus der Gleichung (2.123) erhält man die Bedingung  $\beta \gg \beta_F$ , und damit eine vernünftige Lösung für das chemische Potential, nämlich  $\mu = \epsilon_F$ . Die Gleichung (2.124) liefert uns nach der Exponentenbildung die Temperatur:

$$\frac{\beta_F}{\beta_{krit}} = \frac{8}{\pi} e^{-2} e^C \exp\left(\frac{\pi}{2a_s k_F}\right) \quad (2.125)$$

Somit erhalten wir für unsere analytische Approximation der Temperatur die gepunktete Kurve in Abb. 2.1. Diese Temperatur ist die kritische, der BCS-Theorie der Supraleitung. An dieser Temperatur findet ein Phasenübergang statt, von der normalleitenden zur supraleitenden Phase, in der sich Cooper-Paare bilden.

### 2.5.3 Kritische Temperatur im Grenzfall starker Kopplung

Nun betrachten wir den anderen Fall des negativen chemischen Potentials  $\bar{\mu} < 0$ , und erhalten für die Streulänge  $a_s$  aus Gleichung (2.120):

$$\frac{\pi}{2a_s k_F} = \sqrt{\frac{2|\bar{\mu}|}{\beta}} \frac{\pi}{2}. \quad (2.126)$$

Die Integrale über den hyperbolischen Kosinus verschwinden, weil sie gegen die Diracsche Delta-Distribution konvergieren, aber der Integrationsbereich läuft lediglich über die positive, reelle Achsen. Daraus folgt nach den Rücksubstitutionen die Bestimmungsgleichung des chemischen Potentials:

$$\mu = -\frac{\hbar^2}{2ma_s^2} = -\frac{E_B}{2}, \quad (2.127)$$

wobei wiederum  $|\bar{\mu}| \gg 1$  zu fordern ist. Dabei beschreibt  $E_B$  die Bindungsenergie der Moleküle. Bei Resonanzstreuung hängt für große positive Streulängen die Bindungsenergie mit der Streulänge zusammen über die Gleichung:  $\hbar^2/ma_s^2$ .

Aus der Teilchenzahlgleichung ermittelt man die Temperatur, indem der Nenner von (2.121) als geometrische Reihe entwickelt wird

$$\sqrt{\bar{\beta}}^3 = -4\sqrt{2} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n n \int_0^{\infty} dx \sqrt{x}^3 e^{-2n(x+|\bar{\mu}|)} = -\Gamma\left(\frac{5}{2}\right) \zeta_{3/2}(-e^{\beta\mu}), \quad (2.128)$$

mit der polylogarithmischen Funktion:

$$\zeta_k(z) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n^k}. \quad (2.129)$$

Nimmt man bei der Reihe nur den ersten Term mit und logarithmiert die sich daraus ergebende Gleichung, erhält man mit  $m = \bar{\beta}|\bar{\mu}|$  die genäherte Lösung:

$$m + \frac{3}{2} \ln m = \ln \left( \frac{3\sqrt{\pi}}{4} |\bar{\mu}|^{3/2} \right), \quad (2.130)$$

die unter der Bedingung, daß das der Betrag des chemischen Potentials groß gegen die Fermi-Energie ist, gültig ist  $|\mu| \gg \epsilon_F$ . Vernachlässigt man den Logarithmus gegenüber dem linearen



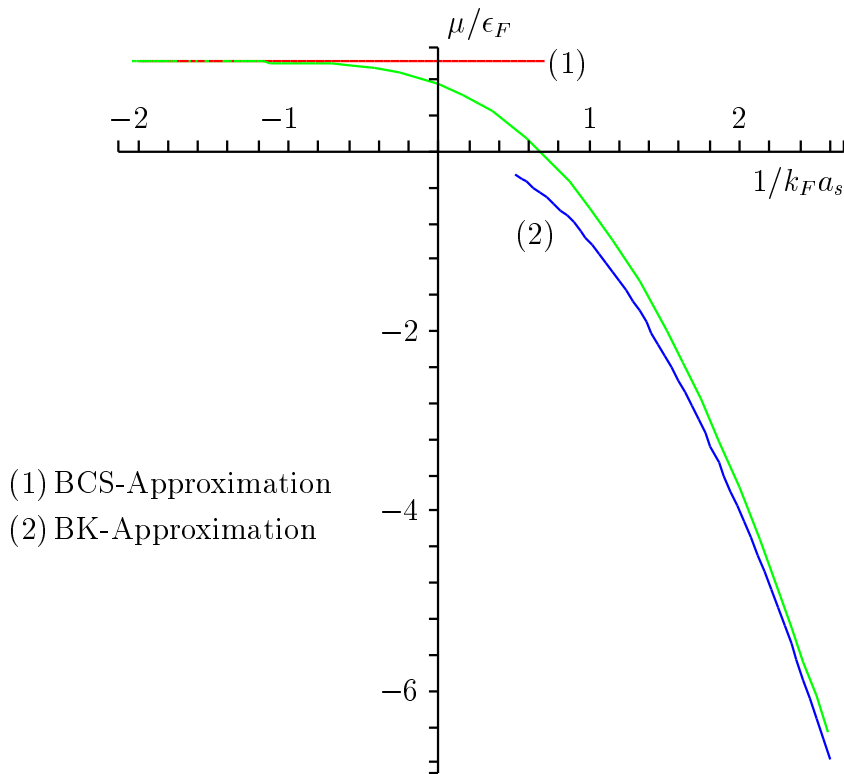


Abbildung 2.2: Abhängigkeit des chemischen Potentials von der s-Wellenstreuung an der kritischen Temperatur.

Glied, so ist die Temperatur unter Berücksichtigung von Gleichung (2.127) näherungsweise bestimmt durch:

$$\beta^{-1} = \frac{E_B}{2 \ln \left[ \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \left( \frac{E_B}{2\epsilon_F} \right)^{3/2} \right]}. \quad (2.131)$$

Abb. 2.2 zeigt, daß das chemische Potential gut durch die beiden Grenzfälle der Molekularfeldapproximation charakterisiert wird. Obwohl das Ergebnis (2.131) aber nur beschreibt, daß sich eine Mischung zweier idealer Gase im Gleichgewicht der Reaktion für die Paarung und den Zerfall zu zweiatomigen Molekülen befindet, wobei die kritische Temperatur der Temperatur entspricht, für die freie Bosonen kondensieren, was wir in den folgenden Rechnungen zeigen werden. Die chemischen Potentiale der beiden Gase sind dann bestimmt zu:

$$\mu_a = g_a + RT \ln \chi_a \quad (2.132)$$

$$\mu_m = g_m + RT \ln \chi_m. \quad (2.133)$$

Im Gleichgewicht der Reaktion gilt für die chemischen Potentiale  $\mu_m = 2\mu_a$ . Mit den molaren Gibbschen Potentialen  $g_a, g_m$  und dem Molenbruch

$$\chi_i = \frac{n_i}{n_a + n_m}. \quad (2.134)$$

Die molaren Gibbschen Potentiale beziehen sich auf 1 Mol des jeweiligen, reinen Gases [32, S. 712]. Die Gleichungen (2.132) und (2.133) stellen wir mit Hilfe der Gleichgewichtsbedingung nach der Temperatur um:

$$k_B T = \frac{k_B}{R} \frac{2g_a - g_m}{\ln \left[ \frac{(1 - \chi_a)}{\chi_a^2} \right]}. \quad (2.135)$$

Die Gibbs-Duhem-Relation wenden wir auf die molaren Gibbschen Potentiale an  $g_i = N_A \mu_i^{(0)}$ . Wir benutzen Gleichung (2.134) und erhalten dann für die Temperatur:

$$k_B T = \frac{2\epsilon_F - \mu_m^{(0)}}{2 \ln \left[ \frac{n_m}{n_a} \sqrt{1 + \frac{n_a}{n_m}} \right]}. \quad (2.136)$$

Das chemische Potential der molekularen Bosonen an der Übergangstemperatur zum Kondensat entspricht gerade der Bindungsenergie der Moleküle  $\mu_m^{(0)} = -E_B$ . Für die Teilchendichte an dieser Temperatur gilt

$$n_m = \frac{\zeta(3/2) \sqrt{2m}^3}{\hbar^3 \sqrt{2\pi}^3} \sqrt{k_B T}^3 \quad (2.137)$$

mit der Riemannschen Zeta-Funktion, die über den Polylogarithmus (2.129) definiert ist zu  $\zeta(k) = \zeta_k(1)$ . Aus Gleichung (2.108) ergibt sich als atomare Teilchendichte,

$$n_a = \frac{\sqrt{2m}^3}{3\pi^2 \hbar^3} \epsilon_F^{3/2} \quad (2.138)$$

sowie aus den letzten beiden Gleichung das Verhältnis zu:

$$\frac{n_m}{n_a} = \frac{3}{2} \zeta \left( \frac{3}{2} \right) \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sqrt{\frac{k_B T^3}{\epsilon_F}} \approx \frac{3}{2} \zeta \left( \frac{3}{2} \right) \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sqrt{\frac{E_B^3}{2\epsilon_F}}. \quad (2.139)$$

Die letzte Näherung ergibt sich aus (2.136) unter Vernachlässigung des atomaren chemischen Potentials, d.h. die Zahl der fermionischen Atome ist gering im Verhältnis zu den Molekülen, was bei großen Kopplungsstärken sicher gerechtfertigt ist. Diese Näherung nehmen wir ebenfalls für die weitere Auswertung von (2.136) an.

Außerdem haben wir den Beitrag des Logarithmus nicht berücksichtigt. Dies ist aber insofern möglich, da wir unser Ergebnis nur in diesen Logarithmus wieder einsetzen. Wir erhalten dann für die Temperatur aus  $\mu_m^{(0)} = -E_B$  und Gleichung (2.139)

$$\beta^{-1} \approx \frac{E_B}{2 \ln \left[ \frac{3}{2} \zeta \left( \frac{3}{2} \right) \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left( \frac{E_B}{2\epsilon_F} \right)^{3/2} \right]}, \quad (2.140)$$

was mit unserem Ergebnis (2.131) sehr gut übereinstimmt.

#### 2.5.4 Auswertung am absoluten Temperaturnullpunkt

Nun betrachten wir die Lücken- und die Teilchenzahlgleichung für verschwindende Temperatur  $\beta \rightarrow \infty$ , so daß die Ausgangsgleichungen (2.111), (2.112) sich darstellen als:

$$\frac{\pi}{a_s k_F} = \int_0^\infty d\tilde{\epsilon} \left( \frac{1}{\tilde{\epsilon}} - \frac{1}{\sqrt{\tilde{\Delta}_0^* \tilde{\Delta}_0 + (\tilde{\epsilon} - \tilde{\mu})^2}} \right) \sqrt{\tilde{\epsilon}}, \quad (2.141)$$

$$\frac{4}{3} = \int_0^\infty d\tilde{\epsilon} \left( 1 - \frac{\tilde{\epsilon} - \tilde{\mu}}{\sqrt{\tilde{\Delta}_0^* \tilde{\Delta}_0 + (\tilde{\epsilon} - \tilde{\mu})^2}} \right) \sqrt{\tilde{\epsilon}} \quad (2.142)$$

In diesen beiden Gleichungen substituieren wir  $\tilde{\epsilon} = x \sqrt{\tilde{\mu}^2 + \tilde{\Delta}_0^* \tilde{\Delta}_0}$  so daß sich die Gleichungen (2.141), (2.142) schreiben lassen als

$$\frac{\pi}{a_s k_F} = \sqrt[4]{\tilde{\Delta}_0^* \tilde{\Delta}_0 + \tilde{\mu}^2} \int_0^\infty dx \frac{1}{\sqrt{x}} \left( 1 - \frac{x}{\sqrt{x^2 - 2tx + 1}} \right), \quad (2.143)$$

$$\frac{4}{3} = \sqrt[4]{\tilde{\Delta}_0^* \tilde{\Delta}_0 + \tilde{\mu}^2} \int_0^\infty dx \sqrt{x} \left( 1 - \frac{x-t}{\sqrt{x^2 - 2tx + 1}} \right) \quad (2.144)$$

mit der Bedingung  $|t| \leq 1$  an den Parameter  $t$ , der sich über Gleichung (2.144) definiert zu:

$$t = \frac{\mu}{\sqrt{\tilde{\Delta}_0^* \tilde{\Delta}_0 + \mu^2}}. \quad (2.145)$$

Um diese Gleichungen einer Berechnungen weiter zugänglich zu machen, führen wir eine erneute Substitution durch:  $u = x + \sqrt{x^2 - 2tx + 1}$ , so daß wir aus unseren beiden Gleichungen folgende erhalten:

$$\frac{\pi}{a_s k_F} = \sqrt{2} \sqrt[4]{\tilde{\Delta}_0^* \tilde{\Delta}_0 + \tilde{\mu}^2} \int_1^\infty du \frac{1 - ut}{\sqrt{u^2 - 1} \sqrt{u - t}^3}, \quad (2.146)$$

$$\frac{4}{3} = \frac{1 - t^2}{\sqrt{2}} \sqrt[4]{\tilde{\Delta}_0^* \tilde{\Delta}_0 + \tilde{\mu}^2}^3 \int_1^\infty du \frac{\sqrt{u^2 - 1}}{\sqrt{u - t}^5}. \quad (2.147)$$

Nach einigen algebraischen Umformungen des Integranden und der Substitution  $v = \sqrt{u - 1}$ , haben wir unsere beiden Integrale eine Summe von Standardintegrale, wie sie in jeder Integraltafel zu finden sind [31], reduziert:

$$\frac{\pi}{a_s k_F} = \sqrt{2}^3 \sqrt[4]{\tilde{\Delta}_0^* \tilde{\Delta}_0 + \tilde{\mu}^2} \int_0^\infty dv \frac{1}{\sqrt{v^2 + 2}} \left[ \frac{1 - t^2}{\sqrt{v^2 + 1 - t}^3} - \frac{t}{\sqrt{v^2 + 1 - t}} \right] \quad (2.148)$$

$$\begin{aligned} \frac{\sqrt{8}}{3} = \sqrt[4]{\tilde{\Delta}_0^* \tilde{\Delta}_0 + \tilde{\mu}^2}^3 \int_0^\infty dv \frac{1 - t^2}{\sqrt{v^2 + 2}} & \left[ \frac{1}{\sqrt{v^2 + 1 - t}} - \frac{1 - t^2}{\sqrt{v^2 + 1 - t}^5} \right. \\ & \left. + \frac{2t}{\sqrt{v^2 + 1 - t}^3} \right]. \end{aligned} \quad (2.149)$$

Die Auswertung der Integrale ergibt eine Lösung in Abhängigkeit vom Parameter  $t$  und der Wurzel  $\sqrt[4]{\tilde{\Delta}_0^* \tilde{\Delta}_0 + \tilde{\mu}^2}$ . Damit sind unsere beiden verbleibenden Größen, das chemische Potential und das Molekularfeld, bestimmt zu

$$\frac{1}{a_s k_F} = \frac{2}{\pi} \sqrt[4]{\tilde{\Delta}_0^* \tilde{\Delta}_0 + \tilde{\mu}^2} \left[ 2E \left( \sqrt{\frac{1+t}{2}} \right) - K \left( \sqrt{\frac{1+t}{2}} \right) \right], \quad (2.150)$$

$$\frac{1}{\sqrt[4]{\tilde{\Delta}_0^* \tilde{\Delta}_0 + \tilde{\mu}^2}^3} = tE \left( \sqrt{\frac{1+t}{2}} \right) + \frac{1-t}{2} K \left( \sqrt{\frac{1+t}{2}} \right). \quad (2.151)$$

Dabei sind die beiden Funktionen  $K(y)$  und  $E(y)$  vollständige Elliptische Integrale der 1. und 2. Gattung.

Um die durchgehenden Kurven in unseren Abbildungen Abb. 2.3, Abb. 2.4 zu zeichnen, eliminieren wir die Wurzel in der Lücken-Gleichung mit Hilfe von (2.151) und nutzen die

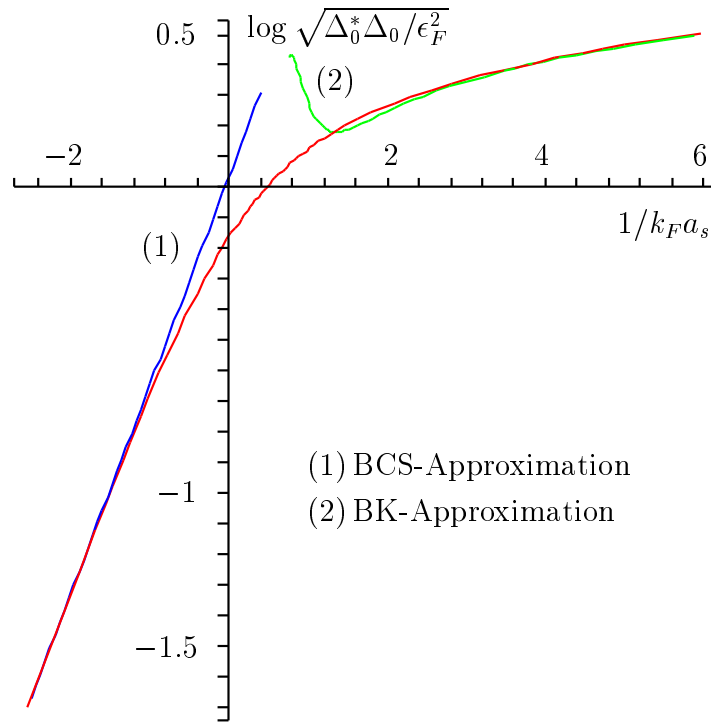


Abbildung 2.3: Abhängigkeit des Molekularfeldes von der s-Wellenstreuung für verschwindende Temperatur.

Definition unseres Parameters  $t$ . Dann erhalten wir die Streulänge, das chemische Potential und Molekularfeld als parameterabhängige Funktionen:

$$\frac{1}{a_s k_F}(t) = \frac{2}{\pi} \frac{2E \left( \sqrt{\frac{1+t}{2}} \right) - K \left( \sqrt{\frac{1+t}{2}} \right)}{\left[ tE \left( \sqrt{\frac{1+t}{2}} \right) + \frac{1-t}{2} K \left( \sqrt{\frac{1+t}{2}} \right) \right]^{1/3}} \quad (2.152)$$

$$\tilde{\mu}(t) = \frac{t}{\left[ tE \left( \sqrt{\frac{1+t}{2}} \right) + \frac{1-t}{2} K \left( \sqrt{\frac{1+t}{2}} \right) \right]^{2/3}} \quad (2.153)$$

$$\sqrt{\tilde{\Delta}_0^* \tilde{\Delta}_0}(t) = \frac{\sqrt{1-t^2}}{\left[ tE \left( \sqrt{\frac{1+t}{2}} \right) + \frac{1-t}{2} K \left( \sqrt{\frac{1+t}{2}} \right) \right]^{2/3}} \quad (2.154)$$

Die Grenzfälle der schwach und stark attraktiven Wechselwirkung ergeben sich aus den Entwicklung der Gleichungen (2.152) bis (2.154) für  $t \rightarrow 1$  und  $t \rightarrow -1$ . Im Fall schwacher Attraktion entwickeln wir die Elliptischen Funktionen um die Stelle  $y = 1$  herum. Da dort die erste Elliptische Funktion logarithmisch divergiert, nehmen wir nur den Beitrag der

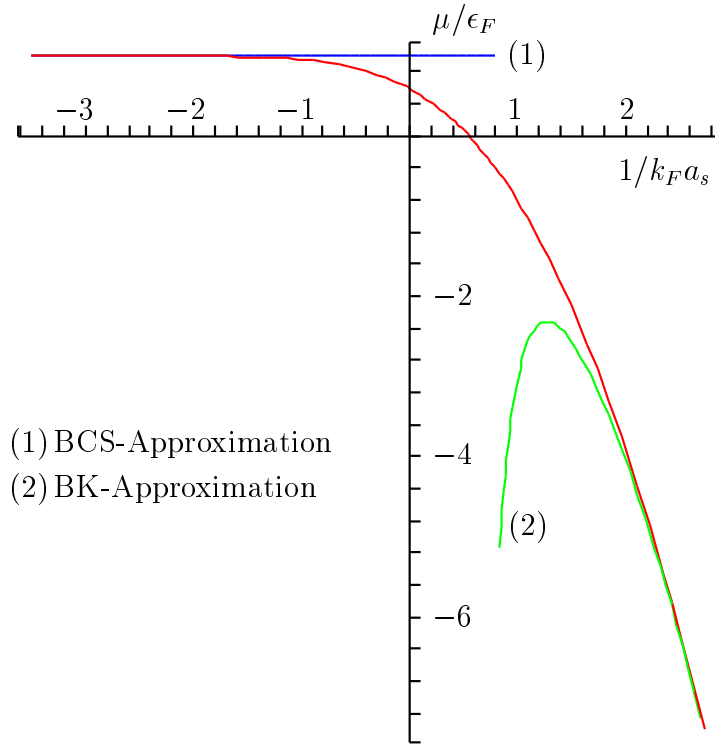


Abbildung 2.4: Abhängigkeit des chemischen Potentials von der s-Wellenstrelänge bei verschwindender Temperatur.

niedrigsten Ordnung mit und erhalten aus den beiden Ausgangsgleichungen (2.150), (2.151):

$$\mu \approx \epsilon_F, \quad (2.155)$$

$$\sqrt{\Delta_0^* \Delta_0} \approx 8\epsilon_F e^{-2} \exp\left(\frac{\pi}{2a_s k_F}\right). \quad (2.156)$$

Das Ergebnis im Grenzfall starker Kopplung ergibt sich aus der Taylor-Entwicklung der Ausgangsgleichungen, indem man die Entwicklung der inversen Funktion von (2.150) durch Umkehrung der Taylor-Reihe berechnet, und diese dann in die parameterabhängigen Darstellungen (2.153) und (2.154) einsetzt. Damit sind chemisches Potential und Molekularfeld bestimmt zu:

$$\tilde{\mu} \approx -\frac{1}{a_s^2 k_F^2} \left(1 - \frac{2}{3\pi} a_s^3 k_F^3 + \dots\right), \quad (2.157)$$

$$\sqrt{\tilde{\Delta}_0^* \tilde{\Delta}_0} \approx \sqrt{\frac{16}{3\pi}} \frac{1}{\sqrt{a_s k_F}} \left(1 - \frac{17}{12\pi} a_s^3 k_F^3 + \dots\right). \quad (2.158)$$

In den Abb. 2.3 und Abb. 2.4 sind die Ergebnisse aus den Gleichungen (2.155), (2.156) mit (1) numeriert. Die Gleichungen (2.157) und (2.158) hingegen mit der (2). Auch ist die Proportionalität des Molekularfeldes bei verschwindender Temperatur (2.156) zur kritischen Temperatur bei verschwindendem Molekularfeld (2.125) auffällig. Setzt man die Ergebnisse zueinander in Verhältnis so ergibt sich:

$$\sqrt{\Delta_0^* \Delta_0}(T=0) \beta (\Delta_0^* \Delta_0 = 0) = \pi e^{-C} \approx 1,76. \quad (2.159)$$

Mit exakt dem selben Wert für das Verhältnis, wie in der BCS-Theorie der Supraleiter. Wobei festzuhalten gilt, daß das Ergebnis (2.125) lediglich eine Approximation der exakten Lösung der Molekularfeldgleichungen darstellt. Man vergleiche auch die beiden Abbildungen 2.2 und 2.4, die zeigen wie stabil das chemische Potential in dieser Näherung ist. Trotz der unterschiedlichen Temperaturen werden die beiden Näherungen exakt reproduziert, und der interpolierende Bereich sehr gut wiedergegeben.





# Kapitel 3

## Feshbach-Resonanz

In diesem Kapitel betrachten wir ein wechselwirkendes atomares Gas, dessen Streulänge über die Hyperfeinstrukturwechselwirkung der äußeren Elektronen mit ihrem eigenen Kern durch ein von Außen vorgegebenes Magnetfeldes durchstimmbare ist. Der Zeemann-Effekt der atomaren Spins ermöglicht die Variation der Energiedifferenz zwischen dem Streuzustand, wenn die beiden Spins parallel angeordnet sind, und einem langlebigem molekülähnlichem Zustand bei antiparallelen Spins. Jedesmal, wenn die Energie der streuenden Teilchen der Energie des langlebigen Zustandes entspricht, divergiert die Streulänge, man spricht dann von einer Feshbach-Resonanz. Diese ist erstmals für Bose-Kondensate in optischen Fallen 1998 von Ketterle et al. beobachtet worden [2]. Der Begriff geht zurück auf H. Feshbach, der in zwei Arbeiten ein Modell der Resonanz des totalen Streuquerschnittes bei Neutronenstreuung an Atomkernen entwickelte [33,34].

### 3.1 Grundlagen

Die Wechselwirkung der Zwei-Teilchen-Resonanzstreuung wird in dieser Arbeit mittels Kastenpotentialen angenähert, in diesem Abschnitt werden die Grundlagen und die wichtigsten Ergebnisse dieses quantenmechanischen Modells präsentiert. Dabei gehen wir in unseren Berechnung immer von zwei Teilchen mit identischer Masse aus, die im Schwerpunktsystem beschrieben werden. Die abseparierte Lösung für die Schwerpunktsbewegung bleibt aber unberücksichtigt, da sie ja lediglich eine ebene Welle darstellt.

#### 3.1.1 Einführung

Der Hamilton-Operator nimmt dann für die beiden identischen Teilchen in Ortsdarstellung die folgende Form an:

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_1 + \Delta_2) + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (3.1)$$

Nach den mechanischen Grundgesetzen kann die Zwei-Teilchen-Wechselwirkung nur abstandsabhängig sein, d.h. das Potential verhält sich gemäß  $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$ . Durch Transformation auf Relativ- und Schwerpunktskoordinaten erhalten wir aus dem Zwei-Teilchen-Hamilton-Operator ein effektives Ein-Teilchen-Problem, mit der Festlegung der Relativ- und Schwerpunktskoordinaten zu:

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \quad \mathbf{r}_S = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}. \quad (3.2)$$

Der ursprüngliche Hamilton-Operator wird separiert

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_S + \hat{\mathcal{H}}_{\text{rel}} \quad (3.3)$$

in die Schwerpunktsbewegung

$$\hat{\mathcal{H}}_S = -\frac{\hbar^2}{4m} \Delta_S, \quad (3.4)$$

und den effektiven Ein-Teilchen-Hamilton-Operator für den Relativabstand  $\mathbf{r}$

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{rel}} = -\frac{\hbar^2}{m} \Delta + V(\mathbf{r}). \quad (3.5)$$

Da die Wechselwirkung der Partikel nur abstandsabhängig ist, reduziert sich Gleichung (3.5) aufgrund der Kugelsymmetrie des effektiven Ein-Teilchen-Operators auf

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{rel}} = -\frac{\hbar^2}{m} \Delta + V(r) \quad (3.6)$$

mit dem Laplace-Operator

$$\Delta = \frac{1}{r} \left( \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 r + \frac{1}{(r \sin \theta)^2} \left[ \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right)^2 + \left( \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)^2 \right]. \quad (3.7)$$

Die Zwei-Teilchen-Wechselwirkung beschreiben wir durch ein Kastenpotential,

$$V(r) = V_0 \Theta(R - r) \quad (3.8)$$

mit der Heavyside Funktion  $\Theta(r)$ . Die Potentialstärke ist durch  $V_0$  charakterisiert und die Reichweite durch die Grösse  $R$ .

Das Eigenwertproblem  $\hat{\mathcal{H}}_{\text{rel}}\psi(r, \theta, \varphi) = E\psi(r, \theta, \varphi)$  des Hamilton-Operators (3.6) lösen wir, indem die Variablen abseparieren, gemäß:  $\psi(r, \theta, \varphi) = Y_{l,m}(\theta, \varphi) R_l(r)$ . Dabei genügt die Kugelflächenfunktion  $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$  der Eigenwertgleichung

$$\left\{ \frac{1}{\sin^2 \theta} \left[ \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right)^2 + \left( \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)^2 \right] + l(l+1) \right\} Y_{l,m}(\theta, \varphi) = 0. \quad (3.9)$$

Der mit  $r$  multiplizierte Radialanteil der Wellenfunktion  $u_l(r) = rR_l(r)$  erfüllt dann die Eigenwertgleichung

$$\left[ \left( \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 + \frac{m}{\hbar^2} V_{\text{eff}}(r) \right] u_l(r) = 0 \quad (3.10)$$

mit dem effektiven Potential

$$\frac{m}{\hbar^2} V_{\text{eff}}(r) = k^2 - \frac{m}{\hbar^2} V_0 \Theta(R-r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \quad (3.11)$$

und dem Energie-Eigenwert

$$E = \frac{\hbar^2}{m} k^2. \quad (3.12)$$

Das Kastenpotential hat, wenn es anziehend ist, gebundene und ungebundene Zustände, bzw. nur ungebundene Streulösungen im repulsiven Fall.

In diesem einführenden Teil diskutieren wir nur die Wellenfunktion für das attraktive Potential, sowie im Anschluß das Phänomen der Resonanzstreuung, welches eine Verknüpfung des diskreten mit dem kontinuierlichem Spektrum darstellt.

### 3.1.2 Streulösungen des Potentials

Die Lösungen der Differentialgleichungen für das kugelförmige Kastenpotential zu verschiedenen Drehimpulsquantenzahlen  $l$  sind die sphärischen Bessel- und von-Neumann-Funktionen der Ordnung  $l$  [35, S. 349, S. 364]. Wir haben noch die Forderung der stetigen Differenzierbarkeit und der Regularität am Ursprung der radialen Wellenfunktion zu berücksichtigen. Die von-Neumann-Funktionen stellen keine Lösungen im Innenbereich dar, weil sie am Ursprung divergieren. Dann ist die Bedingung, daß  $u_l(0)$  beschränkt sein muß, verletzt.

$$R_l(r) = \begin{cases} a_l j_l(k_i r) & , \quad r < R \\ \alpha_l j_l(k_a r) + \beta_l n_l(k_a r) & , \quad r > R \end{cases} \quad (3.13)$$

befriedigt die Regularitätsbedingung am Ursprung und erfüllt die Anschlußbedingungen bei entsprechender Wahl der Koeffizienten. Sie sind bis auf eine Norm eindeutig bestimmt.

Die Anschlußbedingungen am Rand  $r = R$  des Kastenpotentials haben zwei transzendente Gleichungen zur Folge

$$R_l^i(k_i r) \Big|_{r=R} = R_l^a(k_a r) \Big|_{r=R}, \quad (3.14)$$

$$\frac{d}{dr} R_l^i(k_i r) \Big|_{r=R} = \frac{d}{dr} R_l^a(k_a r) \Big|_{r=R} \quad (3.15)$$

mit den beiden Wellenzahlen  $k_i = \sqrt{(E + V_0)m/\hbar^2}$  und  $k_a = \sqrt{Em/\hbar^2}$ .

Das asymptotische Verhalten im Limes großer Partikelabstände ermöglicht eine Interpretation der Koeffizienten des Teils der Wellenfunktion außerhalb des Potentials als Phasenverschiebung der einlaufenden gegenüber der auslaufenden Welle [35, S. 392]. Die einlaufende Welle bestimmen wir aus dem Fall des verschwindenden Potentials. Da die von-Neumann-Funktionen am Ursprung divergieren, bleiben nur die Bessel-Funktionen als einlaufende Welle übrig. Vergleicht man die Asymptotik für großer Partikelabstände der einlaufenden und auslaufenden Welle, so ergibt sich eine Phasenverschiebung  $\delta_l$ . Das Amplitudenverhältnis der auslaufenden Welle bestimmt die Streuphase, für große Abstände  $r$  gilt

$$R_l(r) = \frac{1}{k_a r} \left[ \alpha_l \sin \left( k_a r - l \frac{\pi}{2} \right) - \beta_l \cos \left( k_a r - l \frac{\pi}{2} \right) \right]. \quad (3.16)$$

So erhalten wir für die Streuphase  $\tan \delta_l = -\beta_l/\alpha_l$ . Aus den Anschlußbedingungen (3.14), (3.15) wird die Streuphase berechenbar

$$\tan \delta_l = \frac{k_a \left[ \frac{d}{dx} j_l(x) \right]_{x=k_a r} j_l(k_i r) - k_i \left[ \frac{d}{dx} j_l(x) \right]_{x=k_i r} j_l(k_a r)}{k_a \left[ \frac{d}{dx} n_l(x) \right]_{x=k_a r} j_l(k_i r) - k_i \left[ \frac{d}{dx} j_l(x) \right]_{x=k_i r} n_l(k_a r)} \Big|_{r=R}. \quad (3.17)$$

Für kleine Argumente  $k_a R$  ist eine Näherung der Bessel- und von-Neumann-Funktionen möglich. Dabei beschreibt  $k_a R \ll 1$  kleine Teilchenenergien, also langsame Teilchen, wie sie

in Bose-Kondensaten zu finden sind. Wir nehmen nur die Beiträge der Taylorentwicklung in erster Ordnung für die Argumente  $k_a R$  mit

$$j_l(z) \approx \frac{z^l}{(2l+1)!!}, \quad \frac{d}{dz} j_l(z) \approx \frac{lz^{l-1}}{(2l+1)!!}, \quad (3.18)$$

$$n_l(z) \approx -\frac{(2l+1)!!}{(2l+1)z^{l+1}}, \quad \frac{d}{dz} n_l(z) \approx (l+1) \frac{(2l+1)!!}{(2l+1)z^{l+2}}. \quad (3.19)$$

Daraus ergibt sich für die Streuphase  $\delta_l$  die Näherung

$$\tan \delta_l \approx \frac{(2l+1)(k_a R)^{2l+1}}{[(2l+1)!!]^2} \frac{l j_l(y) - y \frac{d}{dy} j_l(y)}{(l+1) j_l(y) + y \frac{d}{dy} j_l(y)} \Bigg|_{y=k_i R}. \quad (3.20)$$

Ab jetzt betrachten wir nur noch den Beitrag zur Wellenfunktion, den die Partialwelle zum Drehimpuls  $l = 0$  liefert, die sogenannte s-Wellenstreuung. Die geringen Teilchenenergien in ultrakalten Gasen korrespondieren mit kleinen Impulsen der Partikel. Außerdem haben wir es mit kurzreichweitigen Potentialen zu tun, so daß die Anteile der Partialwellen höherer Ordnung unterdrückt werden. Deswegen sind die Beiträge der Partialwellen mit den Drehimpulsen  $l = 1, 2, \dots$  vernachlässigbar, was man an (3.20) ablesen kann.

### 3.1.3 Gebundene Lösungen des Kastenpotentials

Ein attraktives, rotationsinvariantes Kastenpotential kann gebundene Zustände mit diskreten Eigenwerten enthalten. Dabei ist die Randbedingung  $|\psi(0)| < \infty$  am Ursprung, zu beachten. Desweiteren sind die Anschlußbedingungen der Wellenfunktion, die stetige Differenzierbarkeit an der Stelle  $r = R$  fordern, zu erfüllen.

Die Wellenfunktionen des Drehimpulses  $l = 0$  haben dann folgende Form

$$\psi(\mathbf{r}) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{\exp(-k_a |\mathbf{r}|)}{k_a |\mathbf{r}|} & |\mathbf{r}| > R \\ \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{\sin(k_i |\mathbf{r}|)}{k_i |\mathbf{r}|} & |\mathbf{r}| < R \end{cases}. \quad (3.21)$$

Hierbei sind  $k_a, k_i$  bestimmt durch

$$k_a R = \sqrt{\frac{mR^2}{\hbar^2} |E|} = \eta \quad k_i R = \sqrt{\frac{mR^2}{\hbar^2} (V_0 - |E|)} = \zeta. \quad (3.22)$$

Um die Eigenenergien des kugelsymmetrischen Potentialtopfes zu bestimmen, bilden wir das Verhältnis der Gleichung (3.15) zu (3.14), was uns die transzendente Gleichung  $\eta = -\zeta \cot \zeta$  liefert. Diese läßt sich analytisch nicht mehr lösen, ist aber graphisch lösbar. Was in Abb. 3.1, dargestellt ist, wobei wir ausnutzen, daß die Summe der Quadrate von  $\eta, \zeta$  stets konstant ist:

$$\zeta^2 + \eta^2 = \frac{mV_0R^2}{\hbar^2}. \quad (3.23)$$

An Abb. 3.1 erkennt man, daß für gebundene Zustände im kugelsymmetrischen Potentialtopf eine minimale Potentialtiefe vorliegen muß.

### 3.1.4 Resonanzstreuung am Kastenpotential

Zum Schluß dieses Kapitels wollen wir noch das Phänomen der Resonanzstreuung diskutieren. Dazu werden die wichtigsten Ergebnisse der vorherigen Kapitel miteinander verknüpft. Die s-Wellenstreuung an einem Potentialkasten hat die denkbar einfachste Form nach der Propagation der freien Welle. Wir haben nur zwei freie Wellenlösungen, mit verschiedenen  $\mathbf{k}$  Vektoren, die wir am Rande des Kastens zusammenzustückeln:

$$\psi_i(\mathbf{r}) = \frac{a}{\sqrt{4\pi}} \frac{\sin(k_i|\mathbf{r}|)}{k_i|\mathbf{r}|} \quad |\mathbf{r}| < R \quad (3.24)$$

$$\psi_a(\mathbf{r}) = \frac{\alpha}{\sqrt{4\pi}} \frac{\sin(k_a|\mathbf{r}|)}{k_a|\mathbf{r}|} + \frac{\beta}{\sqrt{4\pi}} \frac{\cos(k_a|\mathbf{r}|)}{k_a|\mathbf{r}|} \quad |\mathbf{r}| > R. \quad (3.25)$$

Die Anschlußbedingung für die s-Welle läßt sich schreiben als

$$k_i R \cot(k_i R) = k_a R \cot[k_a R + \delta(k_a)]. \quad (3.26)$$

Durch den Potentialtopf tritt eine Phasendifferenz  $\delta$  auf, die bei verschwindender Energie des einlaufenden Teilchens, d.h. für die Wellenzahl  $k_a \rightarrow 0$ , die s-Wellenstreuulänge des Potentials bestimmt:

$$a_s = - \lim_{k_a \rightarrow 0} \left[ \frac{\delta(k_a)}{k_a} \right]. \quad (3.27)$$

Aufgrund von (3.20) ist der Kotangens zu entwickeln und in führender Ordnung auszuwerten, so daß wir erhalten:

$$a_s = \lim_{k_a \rightarrow 0} \left\{ R \left[ 1 - \frac{\tan(k_i(k_a)R)}{k_i(k_a)R} \right] \right\}. \quad (3.28)$$

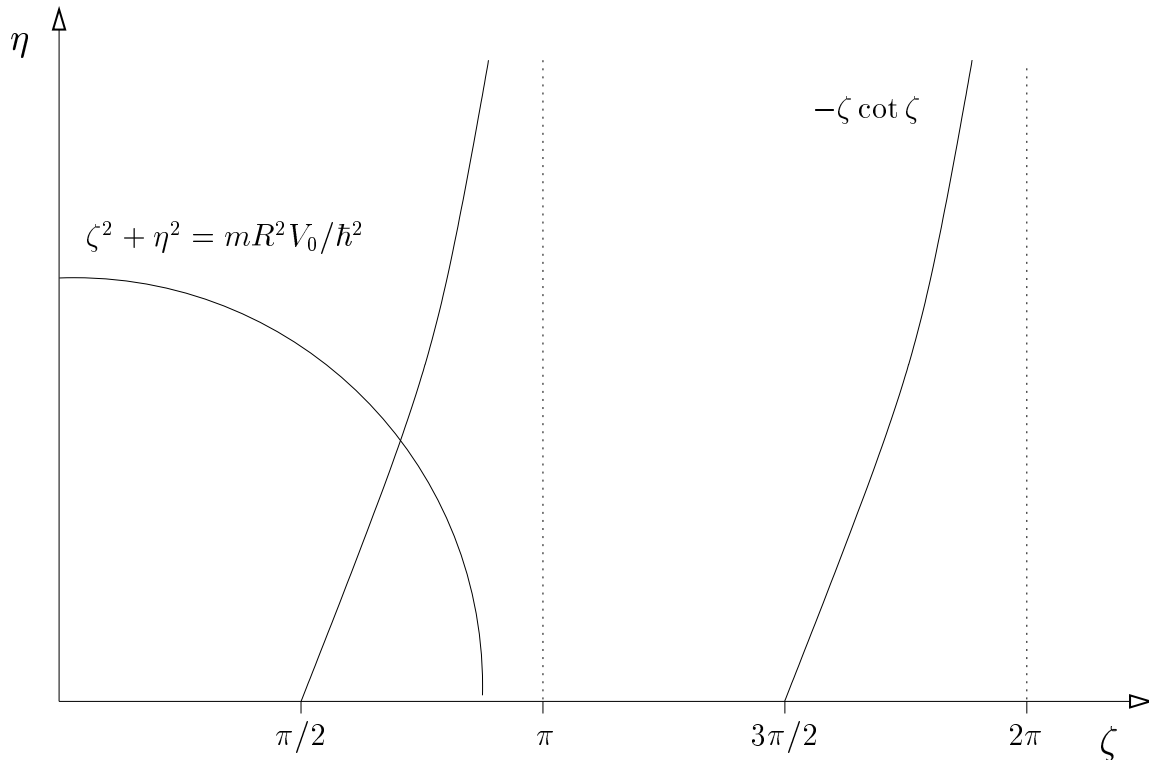


Abbildung 3.1: Graphische Lösung der transzendenten Gleichungen (3.22), (3.23) für die Energie-Eigenwerte in einem kugelsymmetrischen Potentialtopf.

Hierbei ist  $k_i R = \sqrt{\frac{mR^2}{\hbar^2} V_0 + (k_a R)^2}$  noch von der Teilchenenergie  $E = \frac{\hbar^2}{m} k_a^2$  abhängig. Somit bestimmt sich die Streulänge mit  $\gamma \stackrel{\text{def}}{=} \frac{mR^2}{\hbar^2} V_0$  zu:

$$a_s = R \left( 1 - \frac{\tan \gamma}{\gamma} \right). \quad (3.29)$$

An den Stellen  $\gamma = \frac{\pi}{2} + m\pi$ ,  $m \in \mathbb{Z}$  divergiert die Streulänge. Erinnern wir uns kurz an die Abbildung 3.1, aus der die gebundenen Lösungen bestimmt worden sind. An den Stellen  $\zeta = \frac{\pi}{2} + m\pi$ ,  $m \in \mathbb{Z}$  taucht ein neuer, der  $(m+1)$ -te Eigenwert im Spektrum auf, hier divergiert aber gerade  $a_s$ . Dieses Phänomen nennt man Resonanzstreuung, da das Teilchen sehr lange im Potentialtopf verweilt. Wir betrachten die Streulänge  $a_s$  ja im Limes verschwindender Energie der einfallenden Welle, somit liegen der höchste, diskrete Energie-Eigenwert und die Teilchenenergie dicht beieinander, daher bilden die Partikel einen molekülähnlichen Zustand.

An diesen Stellen läßt sich die Bindungsenergie des  $(m+1)$ -ten Eigenwertes über die  $s$ -Wellenstreuung des ungebundenen Zustandes näherungsweise bestimmen,

$$E_{\text{geb}} \simeq -\frac{\hbar^2}{ma_s^2}, \quad (3.30)$$

in der Tat erhalten wir für  $E_{\text{geb}} \ll V_0$ :

$$k_a^{\text{geb}} R = \sqrt{\frac{mR^2}{\hbar^2} |E_{\text{geb}}|} \quad (3.31)$$

$$\begin{aligned} &= -k_i^{\text{geb}} \cot(k_i^{\text{geb}}) \\ &= -\sqrt{\frac{mR^2}{\hbar^2} (V_0 - |E_{\text{geb}}|)} \cot \left[ \sqrt{\frac{mR^2}{\hbar^2} (V_0 - |E_{\text{geb}}|)} \right] \\ &\approx -\sqrt{\frac{mR^2}{\hbar^2} V_0} \cot \left[ \sqrt{\frac{mR^2}{\hbar^2} V_0} \right]. \end{aligned} \quad (3.32)$$

Die Streulängenformel (3.29) wird von uns ebenfalls entwickelt:

$$\begin{aligned} \frac{R}{a_s} &= \frac{\sqrt{\frac{mR^2}{\hbar^2} V_0}}{\sqrt{\frac{mR^2}{\hbar^2} V_0} - \tan \left( \sqrt{\frac{mR^2}{\hbar^2} V_0} \right)} \\ &\approx -\sqrt{\frac{mR^2}{\hbar^2} V_0} \cot \left( \sqrt{\frac{mR^2}{\hbar^2} V_0} \right). \end{aligned} \quad (3.33)$$

Setzt man die erhaltenen Ergebnisse (3.32), (3.33) in Beziehung zueinander, so ergibt sich (3.30). Diese Relation bleibt auch bei der Zweikanalstreuung gültig.

## 3.2 Modell der Feshbachresonanz

Im analytisch rechenbaren Modell der Feshbach-Resonanz koppeln wir die Streulösung eines Kastenpotentials mit den gebundenen. Die Kopplung wird über die Hyperfeinstruktur-Wechselwirkung der Leuchtelektronen mit den eigenem Kernspin induziert. Dieses einfache Modell geht zurück auf [36].

Die interatomare Wechselwirkung wird durch die Coulomb-Kräfte und das Pauli-Prinzip wesentlich bestimmt. Je nach relativer Spin-Stellung der äußeren Elektronen der beiden Streupartner zueinander, variiert die Tiefe der Kastenpotential in unserem einfachen Modell der Resonanz-Streuung mit zwei Wechselwirkungs-Kanälen, die über die Hyperfeinwechselwirkung miteinander gekoppelt sind. Somit stellen sich die Potentiale für die Singulett- und Triplett-Terme dar als

$$V_{\text{S,T}}(\mathbf{r}) = \begin{cases} -V_{\text{S,T}} , & |\mathbf{r}| < R \\ 0 , & |\mathbf{r}| > R \end{cases}. \quad (3.34)$$

Die fermionischen Elektronen im Triplett können sich aufgrund des Pauli-Prinzips nicht zu nahe kommen, deswegen bilden die beiden streuenden Atome auch kein molekülähnlichen Zustand wie bei der Resonanz-Streuung im vorherigen Kapitel.



Durch ein von außen vorgegebenes Magnetfeld  $B$  erhält man die Möglichkeit die Streuung zu steuern, da im Singulett und Triplett durch den verschiedenen Gesamtspin die magnetischen Momente differieren:  $\Delta\mu = \mu_S - \mu_T$ . Somit ist die Schrödinger-Gleichung durch den Zeemann-Effekt zu modifizieren, unter den folgenden Annahmen  $0 < V_{\text{hf}} \ll V_T, V_S, \Delta\mu B$

$$\begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2}{m}\Delta + V_T(\mathbf{r}) - E & V_{\text{hf}} \\ V_{\text{hf}} & -\frac{\hbar^2}{m}\Delta + V_S(\mathbf{r}) + \Delta\mu B - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_T(\mathbf{r}) \\ \psi_S(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.35)$$

Zunächst gilt es, diesen Hamiltonoperator zu diagonalisieren und die Lösungen in Abhängigkeit von den Potentialtopftiefen und der Hyperfeinstruktur anzugeben. Die unitären Transformation, die den Hamiltonoperator diagonalisiert, ist in diesem Fall eine Drehung:

$$U^{-1}(\Theta) = \begin{pmatrix} \cos \Theta & -\sin \Theta \\ \sin \Theta & \cos \Theta \end{pmatrix}, \quad (3.36)$$

wobei die Drehwinkel für unsere Lösungen inner- und außerhalb der Reichweite des Potentials differieren.

Der Hamilton-Operator stellt sich im Außen- und Innenbereich der Wechselwirkungszone in der Basis aus Gleichung (3.35) dar als,

$$\hat{\mathcal{H}}_A = \begin{pmatrix} 0 & V_{\text{hf}} \\ V_{\text{hf}} & \Delta\mu B \end{pmatrix}, \quad (3.37)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_I = \begin{pmatrix} -V_T & V_{\text{hf}} \\ V_{\text{hf}} & \Delta\mu B - V_S \end{pmatrix}. \quad (3.38)$$

Dabei ist die Lösung der Schrödinger Gleichung (3.35) für den Außenbereich, die einer Propagation einer freien Welle entspricht, schon von den gesuchten Eigenvektoren absepariert worden. Damit sind alle Energie-Eigenwerte auf die Energie  $E = \hbar^2 k^2 / m$  der freien Welle im Außenbereich bezogen.

Die Nichtdiagonalelemente der beiden Matrizen stellen die Wechselwirkung der äußeren Elektronen mit dem Spin ihres eigenen Kernes dar. Das magnetfeldabhängige Diagonalelement beschreibt den Unterschied in den magnetischen Momenten zwischen dem Singulett und Triplett. Die Eigenvektoren der Matrizen (3.37) sind dann auf eine frei wählbare Basis zu beziehen und stetig-differenzierbar aneinanderzufügen. Wir werden dafür im folgenden die ursprüngliche Basis  $\psi_T, \psi_S$  benutzen. Nach Separation der Winkelabhängigkeit, die Potentiale sind kugelsymmetrisch, stellen wir die Wellenfunktionen außerhalb und innerhalb des Wechselwirkungsbereichs in ihren jeweiligen Diagonalbasen dar, als  $u_A(r), u_I(r)$  [vgl. Abschnitt 3.1.1 bezgl. der Notation]. Wir betrachten auch hier nur den Beitrag des Drehimpulses  $l = 0$  zu den Wellenfunktionen, dabei bezeichnet der Index A den Außenraum und I die Wechselwirkungszone:

$$\begin{pmatrix} u_A^{\text{Streu}}(r) \\ u_A^{\text{geb}}(r) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Ce^{ikr} + De^{-ikr} \\ Fe^{-\kappa r} \end{pmatrix} \quad r > R, \quad (3.39)$$

$$\begin{pmatrix} u_I^\uparrow(r) \\ u_I^\downarrow(r) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A(e^{ik_\uparrow r} - e^{-ik_\uparrow r}) \\ B(e^{ik_\downarrow r} - e^{-ik_\downarrow r}) \end{pmatrix} \quad r < R. \quad (3.40)$$

Die Eigenwerte der Matrix (3.37) sind die Energien  $E_A^\pm$  der beiden Lösungen der Schrödinger-Gleichung (3.35) für den Außenbereich, für den Innenbereich haben wir (3.38) zu verwenden, so daß sich ergibt:

$$E_I^\pm = \frac{\Delta\mu B - V_T - V_S}{2} \mp \frac{1}{2} \sqrt{(V_S - V_T - \Delta\mu B)^2 + (2V_{\text{hf}})^2}, \quad (3.41)$$

$$E_A^\pm = \frac{\Delta\mu B}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(\Delta\mu B)^2 + (2V_{\text{hf}})^2}. \quad (3.42)$$

Da wir die Energie bezüglich des kleineren Eigenwertes der Außenlösung messen, findet diese Berücksichtigung bei der Bestimmung der Energieabhängigkeit der Wellenzahlen, indem dort Energiedifferenzen und die Wellenzahl der freien Lösung des Außenraumes auftauchen:

$$\kappa R = \sqrt{\frac{mR^2}{\hbar^2} (E_A^+ - E_A^-) - (kR)^2}, \quad (3.43)$$

$$k_\uparrow R = \sqrt{\frac{mR^2}{\hbar^2} (E_A^- - E_I^-) + (kR)^2}, \quad (3.44)$$

$$k_\downarrow R = \sqrt{\frac{mR^2}{\hbar^2} (E_A^- - E_I^+) + (kR)^2}. \quad (3.45)$$

Bezeichnen wir die diagonalen Hamilton-Operatoren mit  $\hat{\mathcal{H}}_\kappa^d$  für  $\kappa = I, A$ , so erhalten wir die ursprüngliche Schrödinger-Gleichung, indem wir die unitäre Transformation (3.36) auf folgende Weise anwenden:  $U(\Theta_\kappa) \hat{\mathcal{H}}_\kappa^d U^{-1}(\Theta_\kappa)$ . Für die Nichtdiagonalelemente der Matrix führt das auf die Bestimmungsgleichung für die gesuchten Drehwinkel:

$$\frac{\tan \Theta_\kappa}{1 + \tan^2 \Theta_\kappa} = \frac{V_{\text{hf}}}{E_\kappa^+ - E_\kappa^-}. \quad (3.46)$$

Die beiden Winkel bestimmen sich aus dieser Gleichung zu:

$$\tan 2\Theta_A = -\frac{2V_{\text{hf}}}{\Delta\mu B}, \quad (3.47)$$

$$\tan 2\Theta_I = \frac{V_{\text{hf}}}{V_S - V_T - \Delta\mu B}. \quad (3.48)$$

Wir setzen nun die Wellengleichung stetig-differenzierbar zusammen

$$U^{-1}(\Theta_A) \left( \begin{array}{c} u_A^{\text{Streu}}(r) \\ u_A^{\text{geb}}(r) \end{array} \right) \Big|_{r=R} = U^{-1}(\Theta_I) \left( \begin{array}{c} u_I^{\uparrow}(r) \\ u_I^{\downarrow}(r) \end{array} \right) \Big|_{r=R}, \quad (3.49)$$

$$U^{-1}(\Theta_A) \frac{\partial}{\partial r} \left( \begin{array}{c} u_A^{\text{Streu}}(r) \\ u_A^{\text{geb}}(r) \end{array} \right) \Big|_{r=R} = U^{-1}(\Theta_I) \frac{\partial}{\partial r} \left( \begin{array}{c} u_I^{\uparrow}(r) \\ u_I^{\downarrow}(r) \end{array} \right) \Big|_{r=R}. \quad (3.50)$$

Diese vier Gleichungen bestimmen nun die fünf Variablen A, B, C, D, F bis auf die Norm. Da wir aber für die s-Wellenstrelänge nur das Verhältnis zweier Variablen benötigen, nämlich C, D spielt die Normierung keine Rolle. Aus den Koeffizienten der Streulösung dieses Modells läßt sich die s-Wellenstrelänge  $a_s$  bestimmen über die Gleichungen

$$a_s = -\lim_{k \rightarrow 0} \left( \frac{\delta_0(k)}{k} \right), \quad e^{2i\delta_0(k)} = -\frac{C}{D}. \quad (3.51)$$

Nachdem wir die Gleichungen (3.49), (3.50) aufgelöst haben, ergibt sich für das Verhältnis

$$a_s = -\frac{C}{D} = R \left( 1 - \frac{R\beta(k=0)}{R^2\alpha(k=0)} \right), \quad (3.52)$$

wobei die beiden Koeffizienten bestimmt sind zu:

$$R^2\alpha = \frac{1 + \tan^2(\Theta_A - \Theta_I)}{\tan(k_{\uparrow}R) \tan(k_{\downarrow}R)} (k_{\uparrow}R)(k_{\downarrow}R) + \kappa R \left( \frac{(k_{\uparrow}R)}{\tan(k_{\uparrow}R)} + \frac{(k_{\downarrow}R) \tan^2(\Theta_A - \Theta_I)}{\tan(k_{\downarrow}R)} \right) \quad (3.53)$$

$$R\beta = \frac{(k_{\downarrow}R)}{\tan(k_{\downarrow}R)} + \frac{(k_{\uparrow}R) \tan^2(\Theta_A - \Theta_I)}{\tan(k_{\uparrow}R)} + (1 + \tan^2(\Theta_A - \Theta_I)) \kappa R. \quad (3.54)$$

Entwickelt man nun die Strelänge an der Resonanzstelle  $B_0$ , erhält man die folgende Formel

$$a_s(B) = a_{\text{Hg}} \left( 1 - \frac{\Delta B}{B - B_0} \right). \quad (3.55)$$

Die Position der Resonanz  $B_0$  erhält man, indem man den Nenner (3.53) von Gleichung (3.52) Null setzt. Diese Bedingung ist aber nur noch numerisch lösbar. Um diese Magnetfeldstärke sind dann Zähler und Nenner herum zu entwickeln. Aus einer Abschätzung des Nenners läßt sich ablesen, daß nur eine Resonanzstelle  $B_0$  existiert.

Für das Zahlenbeispiel  $V_S = 10\hbar^2/mR^2$ ,  $V_T = 1\hbar^2/mR^2$ ,  $V_{\text{hf}} = 0,1\hbar^2/mR^2$  ergibt sich für Hintergrundsstrelänge  $a_{\text{Hg}} \approx -0,542R$ , Breite der Resonanz  $\Delta B \approx -0,044\hbar^2/mR^2\Delta\mu$  und für die Position der Resonanz  $B_0 \approx 4,637\hbar^2/mR^2\Delta\mu$ .

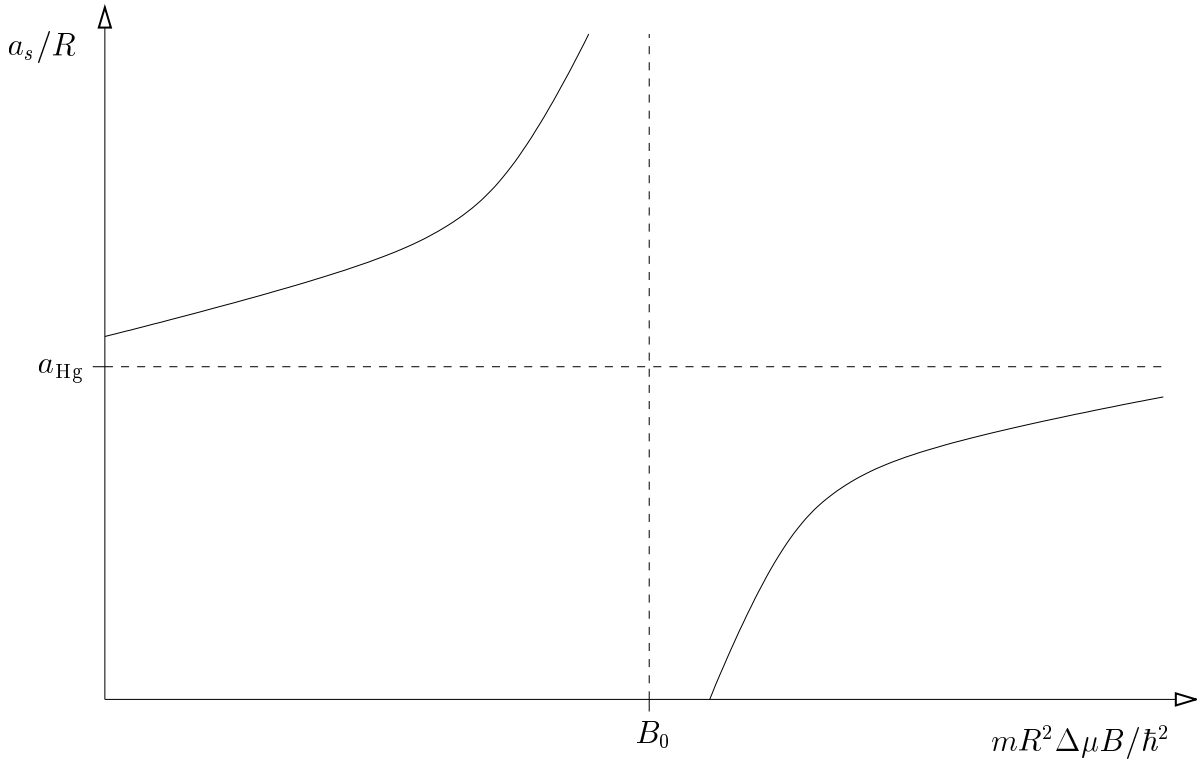


Abbildung 3.2: Skizze der  $B$ -Feldabhängigkeit der Feshbach-Resonanz nach Formel (3.55)

Diese Werte stellen wir den Ergebnissen, die wir ohne die Kopplung durch die Hyperfeinstrukturwechselwirkung für die Streulänge des Triplett-Zustandes und die Bindungsenergie des Singulett erhalten, gegenüber:  $a_T = -0,56R$ ,  $E_S \approx 4,62\hbar^2/mR^2\Delta\mu$ . Diese Zahlenwerte erhält man, indem man in dieser Theorie die Hyperfeinwechselwirkung  $V_{\text{hf}}$  Null setzt. Die Abweichung zu den Werten, die wir aus den gekoppelten Gleichungen enthalten, entspricht in beiden Fällen in etwa dem Quadrat der Hyperfeinstrukturwechselwirkungsstärke  $V_{\text{hf}}$ .

Um diese augenfällige Beobachtung zu überprüfen, entwickeln wir in (3.52) den Zähler und Nenner jeweils um eine Magnetfeldstärke  $B_0$ , die uns die Resonanzbedingung vorgibt. Genau an dieser Stelle muß ja die Streulänge  $a_s$  divergieren, d.h. der Nenner (3.53) muß dort eine Nullstelle besitzen. Wir setzen nun das gesuchte Magnetfeld als Potenzreihe in der Variablen  $(2V_{\text{hf}})^2$  an

$$B_0 = B_{00} + B_{01}(2V_{\text{hf}})^2 + \dots, \quad (3.56)$$

weil alle Terme in (3.53) und (3.54) nur quadratisch von dieser Variablen abhängen.  $B_{00}$  entspricht der Bindungsenergie des Singulett ohne die Kopplung durch die Hyperfeinstruktur. Diese Potenzreihe setzen wir in den Nenner von  $a_s$  ein, und bestimmen so das Magnetfeld an dem die Streulänge divergiert. Wir erhalten in diesem Modell nur eine Resonanzstelle, die Feldstärke  $B_0$  ist damit eindeutig bestimmt.

Dieses Ergebnis setzen wir wiederum in (3.53), (3.54) ein, diesmal aber mit einem beliebigen Magnetfeldstärke  $B$ , und entwickeln beide getrennt in in der Abweichung  $B - B_0$ . Aus

der Resonanzbedingung folgt dann ja, daß der Taylor-Koeffizient der 0.-ten Ordnung bei  $B_0$  verschwindet. Die Entwicklung von (3.53) beginnt dann mit dem linearen Glied. Nun klammern wir diesen Glied aus dem Nenner von (3.52) aus, und behandeln die verbleibenden Terme als geometrische Reihe. Dann ergibt sich für die Streulänge (3.55)

$$a_s(B, V_{\text{hf}}) = R \left\{ 1 - \frac{\beta'(B_0, V_{\text{hf}})\alpha'(B_0, V_{\text{hf}}) - \frac{1}{2}\beta(B_0, V_{\text{hf}})\alpha''(B_0, V_{\text{hf}})}{R[\alpha'(B_0, V_{\text{hf}})]^2} \right\} \quad (3.57)$$

$$\left\{ 1 - \frac{\alpha'(B_0, V_{\text{hf}})\beta(B_0, V_{\text{hf}})}{R[\alpha'(B_0, V_{\text{hf}})]^2 - \beta'(B_0, V_{\text{hf}})\alpha'(B_0, V_{\text{hf}}) + \frac{1}{2}\beta(B_0, V_{\text{hf}})\alpha''(B_0, V_{\text{hf}})} \frac{1}{B - B_0} \right\}.$$

Hierbei bezeichnet ein Strich die partielle Ableitung nach dem Magnetfeld.

Um unsere vermutete Abhängigkeit der Streulänge von der Hyperfeinstrukturkopplung  $V_{\text{hf}}$  zu berechnen, setzen wir die Potenzreihe (3.56) von  $B_0$  in die Zähler- und Nennerfunktionen ein und haben eine weitere Taylor-Entwicklung der Terme in (3.57), nun aber nach der Variablen  $(2V_{\text{hf}})^2$  durchzuführen, so erhalten wir für die Hintergrundstreulänge:

$$a_{\text{Hg}} = R \left\{ 1 - \frac{\beta'(B_{00}, 0)}{R\alpha'(B_{00}, 0)} \right. \quad (3.58)$$

$$+ (2V_{\text{hf}})^2 \frac{\beta'(B_{00}, 0)\dot{\alpha}'(B_{00}, 0) + \frac{1}{2}\alpha''(B_{00}, 0)\dot{\beta}(B_{00}, 0) - \dot{\beta}'(B_{00}, 0)\alpha'(B_{00}, 0)}{R[\alpha'(B_{00}, 0)]^2}$$

$$\left. + B_{01}(2V_{\text{hf}})^2 \frac{\frac{3}{2}\alpha''(B_{00}, 0)\beta'(B_{00}, 0) - \beta''(B_{00}, 0)\alpha'(B_{00}, 0)}{R[\alpha'(B_{00}, 0)]^2} \right\}.$$

Dabei kürzen wir die partielle Ableitung nach der Hyperfeinwechselwirkungsstärke mit einem Punkt über den Funktionen ab

Hierbei haben wir noch  $\beta(B_{00}, 0) = 0$ , benutzt mit  $\beta(B, V_{\text{hf}})$  aus (3.54). Diese Bedingung stellt ja nichts anderes als die Resonanzbedingung im ungekoppelten Fall dar. Die Breite der Resonanz berechnet sich dann zu

$$\Delta B = (2V_{\text{hf}})^2 \frac{\dot{\beta}(B_{00}, 0)\alpha'(B_{00}, 0) - \dot{\alpha}(B_{00}, 0)\beta'(B_{00}, 0)}{\alpha'(B_{00}, 0)[\alpha'(B_{00}, 0) - \beta'(B_{00}, 0)]}. \quad (3.59)$$

Die Ergebnisse (3.58), (3.59) decken sich hervorragend mit unserer Beobachtung, die wir am Zahlenbeispiel gemacht haben.

Analog der Gleichung (3.30) wollen wir auch im gekoppelten Fall die s-Wellenstreulänge mit der Energie des größten Eigenwertes in Verbindung bringen. Dazu haben wir den gebundenen Zustand der Schrödinger-Gleichung für den Singulett- und Triplett-Term zu finden, dies ist aber nichts anderes, als in der Streulösung  $u_{\text{A}}^{\text{Streu}}(r)$  die Wellenzahl rein imaginär zu wählen, wobei der im Unendlichen divergierende Teil aufgrund der Randbedingungen nicht

berücksichtigt wird. Wir haben also in (3.39), (3.40) lediglich  $ik$  durch  $-\kappa_1$  zu ersetzen, und  $D = 0$  zu wählen.

Die beiden Wellenfunktionen sind dann noch stetig-differenzierbar aneinanderzufügen. Dies geschieht, indem wir die Gleichungen (3.49) und (3.50) mit  $U(\Theta_1)$  multiplizieren und jeweils die rechten Seiten der beiden Gleichung subtrahieren, so daß wir ein homogenes Gleichungssystem in vier Variablen, nämlich A, B, C, F, zu lösen haben.

Da wir nur eine Bedingung für  $\kappa_1$ , der Wellenzahl und somit der Energie des gebundenen Zustands, benötigen, berechnen wir die Determinante des homogenen Gleichungssystems, die verschwinden muß. Dann erhalten wir die Gleichung

$$-\kappa_1 R = \frac{R^2 \alpha(k=0)}{R\beta(k=0)}, \quad (3.60)$$

mit den gleichen Funktionen wie in (3.53) und (3.54). Nun betrachten wir die Streulänge ja an der Resonanzstelle, an der der Nenner (3.53) ja sehr klein wird. Dann können wir (3.60) weiter umformen

$$-\kappa_1 R \approx \frac{R^2 \alpha(k=0)}{R\beta(k=0) - R^2 \alpha(k=0)} = \frac{-1}{1 - \frac{R^2 \alpha(k=0)}{R\beta(k=0)}} = -\frac{R}{a_s(B)}. \quad (3.61)$$

Der größte, gebundene Energie-Eigenwert bei Kopplung des Singulett- und Triplettzustandes verhält sich zur s-Wellenstreulänge  $a_s$  genauso wie bei der einfachen Resonanzstreuung (3.30)

$$E_m = \frac{\hbar^2}{m[a_s(B)]^2}, \quad (3.62)$$

nur daß wir bei der Feshbach-Resonanz die Energie (3.62) und Streulänge (3.55) mittels eines äußeren Magnetfeldes  $B$  durchstimmen können und beliebige Streulängen einstellbar sind.

# Kapitel 4

## Ausblick

Zum Abschluß dieser Arbeit wollen wir kurz festhalten, was wir mit diesem Modell der Molekülkondensation erreicht haben, und was noch zu tun bleibt. Die Molekularfeldtheorie reproduziert im Limes schwacher Kopplungsstärken die BCS-Supraleitung. Wir erhalten den korrekten Ausdruck für die kritische Temperatur und für die Energielücke am absoluten Temperaturnullpunkt, damit natürlich auch, daß das Ergebnis der Energielücke bei  $T = 0$  proportional zur kritischen Temperatur  $k_B T_{krit}$  ist. Der Fall starker Wechselwirkung wird durch diesen Modell hingegen nicht mehr richtig beschrieben. Hierzu reicht unsere Näherung nicht mehr aus. Die naheliegendste Erweiterung wäre die exakte Lösung der Teilchenzahl- und Lückengleichung, angelehnt an den  $T = 0$ -Fall, für beliebige Temperaturen, so daß man diese Theorie komplett gelöst hätte. Da man in diesem Fall, über die Gleichungen für weitere Größen, wie z.B. die Wärmekapazität oder die superfluide Dichte verfügt. Eine Verallgemeinerung ist die Mitnahme der Fluktuationsbeiträge zur effektiven Wirkung, was eine wirklichkeitsgetreuere Theorie ergibt. Dafür wäre ein Verfahren zu entwickeln, das es gestattet die Matsubara-Frequenzen des Spurlogarithmus der Fluktuationen aufzusummieren, oder aber eine andere Darstellung des Spurlogarithmus zu wählen. Eine Verallgemeinerung im Rahmen der Molekularfeldtheorie ist die Berücksichtigung der Hartree- und Fock-Beiträge, statt nur des Bogoliubov-Terms, der die Paarbildung beschreibt. Kann man dann die Physik im Übergangsbereich und bei starker Kopplung korrekt beschreiben, ist eine bessere Einarbeitung der Feshbach-Resonanz in diese Theorie nötig. Die Charakterisierung der Streuung mittels eines Parameters, der  $s$ -Wellenstreuulänge, sollte der Beschreibung durch die T-Matrix weichen, die eine mikroskopisch korrekte Darstellung der Resonanzstreuung liefert [38–42].





# Anhang A

## Grassmann-Felder

In diesem Anhang werden die Ergebnisse zusammengefaßt, die für die Anwendung von Grassmann-Feldern zur Beschreibung von fermionischen Vielteilchensystemen benötigt werden.

### A.1 Grassmann-Variablen

Zunächst führen wir Grassmann-Variablen ein, die im Gegensatz zu komplexen Zahlen antikommutieren. Für  $n$  Grassmann-Variablen  $\Theta_1, \dots, \Theta_n$  gelten folgende grundlegende algebraische Relationen:

$$\{\Theta_i, \Theta_j\} = 0, \quad (\text{A.1})$$

wobei die Klammer den Antikommutator bezeichnet:

$$\{\Theta_i, \Theta_j\} = \Theta_i \Theta_j + \Theta_j \Theta_i. \quad (\text{A.2})$$

Im Falle  $i = j$  folgt hieraus:

$$\{\Theta_i, \Theta_i\} = 2\Theta_i^2 = 0. \quad (\text{A.3})$$

Eine Funktion  $g(\Theta)$  mit  $\Theta^T = (\Theta_1, \dots, \Theta_n)$  hat wegen (A.3) eine endliche Taylor-Entwicklung der Form:

$$g(\Theta) = g^{(0)} + \sum_{i_1} g_{i_1}^{(1)} \Theta_{i_1} + \sum_{i_1 < i_2} g_{i_1 i_2}^{(2)} \Theta_{i_1} \Theta_{i_2} + \dots + \sum_{i_1 < \dots < i_n} g_{i_1 \dots i_n}^{(n)} \Theta_{i_1} \dots \Theta_{i_n}. \quad (\text{A.4})$$

Analog zu normalen Zahlen führen wir die Differentiation nach Grassmann-Variablen ein:

$$\frac{d}{d\Theta_i} 1 = 0, \quad \frac{d}{d\Theta_i} \Theta_j = \delta_{ij}. \quad (\text{A.5})$$

Unter Berücksichtigung der Antikommutativität (A.1) läßt sich die Produktregel ableiten:

$$\frac{d}{d\Theta_i} (\Theta_j \Theta_k) = \left( \frac{d}{d\Theta_i} \Theta_j \right) \Theta_k - \left( \frac{d}{d\Theta_i} \Theta_k \right) \Theta_j = \delta_{ij} \Theta_k - \delta_{ik} \Theta_j. \quad (\text{A.6})$$

Entsprechend folgt die Leibniz-Regel:

$$\frac{d}{d\Theta_j} (\Theta_{i_1} \dots \Theta_{i_m}) = \sum_{k=1}^m \delta_{ji_k} (-1)^{k-1} \Theta_{i_1} \dots \Theta_{i_{k-1}} \Theta_{i_{k+1}} \dots \Theta_{i_m}. \quad (\text{A.7})$$

Wir definieren uns nun eine Grassmann-Funktion  $\zeta^{(k)}(\mathbf{x})$  als Produkt von  $n$ -Grassmann-Variablen, bei der die  $k$ -te Variable fehlt:

$$\zeta^{(k)}(\Theta) \stackrel{\text{def}}{=} \Theta_{i_1} \dots \Theta_{i_{k-1}} \Theta_{i_{k+1}} \dots \Theta_{i_n}. \quad (\text{A.8})$$

Hiermit stellt sich Gleichung (A.7) dar als:

$$\left( \frac{d}{d\Theta_j} \Theta_{i_1} + \Theta_{i_1} \frac{d}{d\Theta_j} \right) \zeta^{(1)}(\Theta) = \delta_{ji_1} \zeta^{(1)}(\Theta). \quad (\text{A.9})$$

Nun kann aber  $\zeta^{(1)}(\Theta)$  in dem Sinne beliebig gewählt werden, daß wir beliebige Längen  $n$  von Grassmann-Variablen verwenden und diese dann addieren, so daß eine willkürliche Grassmann-Funktion gebildet werden kann. Wenn aber  $\zeta^{(1)}(\Theta)$  irgendeine Grassmann-Funktion ist, dann erfüllt schon der Antikommutator von Variable und ihrer Ableitungen die Gleichung:

$$\left\{ \frac{d}{d\Theta_j}, \Theta_i \right\} = \delta_{ij}. \quad (\text{A.10})$$

Auf ähnliche Weise berechnen wir die Antikommutatorrelation der Grassmann-Ableitungen:

$$\left\{ \frac{d}{d\Theta_j}, \frac{d}{d\Theta_k} \right\} = 0, \quad (\text{A.11})$$

indem wir (A.9) nochmals nach  $\Theta_k$  ableiten, die Indizes  $j$  und  $k$  vertauschen und beide Gleichungen miteinander addieren, erhalten wir:

$$\left\{ \frac{d}{d\Theta_k}, \frac{d}{d\Theta_j} \right\} \xi(\Theta) = 0, \quad (\text{A.12})$$

wobei auch  $\xi(\Theta) = \Theta_{i_1} \zeta^{(1)}(\Theta) - \zeta^{(1)}(\Theta)$  beliebig wählbar ist.

Als zweite wichtige analytische Operation führen wir nun die Integration über Grassmann-Variable ein.

Dabei lassen wir uns von der Beobachtung motivieren, daß das uneigentliche Integral über die ganze reelle Achse translationsinvariant ist:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dy f(y+z), \quad (\text{A.13})$$

und daß bei einem hinreichend schnell im Unendlichen abfallenden Integral gilt:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{df(x)}{dx} = 0. \quad (\text{A.14})$$

Analog zu (A.13) fordern wir dies auch für die Grassmann-Integration:

$$\int d\Theta g(\Theta + \eta) = \int d\Theta g(\Theta). \quad (\text{A.15})$$

Desweiteren legen wir eine Normierung des neuen Integrals fest zu:

$$\int d\Theta_i \Theta_j = \delta_{ij}. \quad (\text{A.16})$$

Wie in Gleichung (A.14) fordern wir auch im antikommutierenden Fall:

$$0 = \int d\Theta_k \left( \frac{d}{d\Theta_i} \Theta_i \right) = \int d\Theta_k 1. \quad (\text{A.17})$$

Vergleichen wir die Differentiationsregel (A.5) mit den Integrationsregeln (A.16) und (A.17), so sehen wir das sie identisch sind. Demnach sind für Grassmann-Variablen Integration und Differentiation ein und dasselbe, d.h. es gilt:

$$\int d\Theta_n \dots d\Theta_1 g(\Theta) = g^{(n)} = \frac{d}{d\Theta_n} \dots \frac{d}{d\Theta_1} g(\Theta). \quad (\text{A.18})$$

Nun fordern wir wiederum analog zum Riemann-Integral, daß eine lineare Transformation der Koordinaten den Wert des Grassmann-Integrals nicht ändert. Die Transformation hat bei einer Grassmann-Variablen die Form:

$$\int d\Theta' g(\Theta') = \int d\Theta' (g^{(0)} + g^{(1)}\Theta') = g^{(1)}. \quad (\text{A.19})$$

Damit erhalten wir bei einer naiven Behandlung der linearen Transformation zunächst:

$$\int d\Theta g(\Theta'(\Theta)) = \int d\Theta [(g^{(0)} + g^{(1)}\eta) + ag^{(1)}\Theta] = ag^{(1)}. \quad (\text{A.20})$$

Der Vergleich der beiden Gleichungen zeigt, daß (A.20) durch einen zusätzlichen Faktor abgeändert werden muß. Die Jacobi-Determinante bei mehreren Variablen lautet entsprechend:

$$\det \mathbf{J} = \det \left( \frac{\partial \Theta'_i}{\partial \Theta_j} \right), \quad (\text{A.21})$$

in einer Dimension gilt:

$$\int d\Theta g(\Theta'(\Theta)) = \frac{1}{\det \mathbf{J}} \int d\Theta' g(\Theta'), \quad (\text{A.22})$$

wobei

$$\det \mathbf{J} = \frac{d\Theta'}{d\Theta} = a. \quad (\text{A.23})$$

Wir definieren das Volumenelement des  $n$ -dimensionalen Grassmann-Integrals als:

$$\int d\Theta_1 \dots d\Theta_n f(\Theta) = \int d^n \Theta f(\Theta). \quad (\text{A.24})$$

Damit gilt allgemein:

$$\int d^n \Theta' g(\Theta') = \int d^n \Theta (\det \mathbf{J})^{-1} g(\Theta'(\Theta)). \quad (\text{A.25})$$

Mit diesem Ergebnis können wir nun das Gaußsche Grassmann-Integral berechnen:

$$\begin{aligned}
\int d^n \Theta \exp \left( -\frac{1}{2} \Theta^T \mathbf{A}^{-1} \Theta + \rho^T \Theta \right) &= \int d^n \Theta \exp \left( -\frac{1}{2} \Theta^T \mathbf{A}^{-1} \Theta + \rho^T \Theta \mp \frac{1}{2} \rho^T \mathbf{A} \rho \right) \\
&= \int d^n \Theta' \exp \left( -\frac{1}{2} \Theta'^T \mathbf{A}^{-1} \Theta' \right) \exp \left( \frac{1}{2} \rho^T \mathbf{A} \rho \right) \\
&= \sqrt{\det \mathbf{A}^{-1}} \exp \left( \frac{1}{2} \rho^T \mathbf{A} \rho \right). \tag{A.26}
\end{aligned}$$

Das Gaußsche Grassmann-Integral berechnet sich dabei für eine reelle, antisymmetrische Matrix  $\mathbf{A}^{-1}$  mit gerader Dimension. Sie kann mittels einer unitären Transformation auf die folgenden Blockgestalt gebracht werden (Beweis findet sich in z.B. in [37, S.483]):

$$\mathbf{A}'^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & \lambda_1 & 0 & 0 & \cdots \\ -\lambda_1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_2 & \cdots \\ 0 & 0 & -\lambda_2 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \tag{A.27}$$

Das Spektrum dieser antisymmetrischen Matrix beinhaltet jeweils einen Eigenwert und den dazu negativen Eigenwert. Also liegen höchstens  $n/2$  betragsmäßig unterschiedliche Eigenwerte vor. Da die Transformation unitär ist, gilt:

$$\det \mathbf{A}^{-1} = \det \left( \mathbf{U}^{-1} \mathbf{A}'^{-1} \mathbf{U} \right) = \det \mathbf{A}'^{-1}. \tag{A.28}$$

Außerdem geht aus  $\mathbf{A}'^{-1}$  eine Diagonalmatrix  $\tilde{\mathbf{A}}^{-1}$  hervor, wenn wir  $n/2$  Vertauschungen von benachbarten Spalten durchführen, wobei jede das Vorzeichen von  $\det \mathbf{A}'^{-1}$  ändert:

$$\det \mathbf{A}'^{-1} = (-1)^{\frac{n}{2}} \det \tilde{\mathbf{A}}^{-1} = (-1)^{\frac{n}{2}} (-1)^{\frac{n}{2}} \lambda_1^2 \dots \lambda_{\frac{n}{2}}^2 = \prod_{j=1}^{\frac{n}{2}} \lambda_j^2. \tag{A.29}$$

Diese Transformation ändert das Grassmann-Integral nur dahingehend, daß  $\mathbf{A}^{-1}$  durch  $\mathbf{A}'^{-1}$  ersetzt wird, und stattdessen über gestrichene Grassmann-Variable integriert wird. Das Gaußsche Integral stellt sich dann dar als:

$$\int d^n \Theta' \exp \left[ -\frac{1}{2} (\Theta'_1 \lambda_1 \Theta'_2 - \Theta'_2 \lambda_1 \Theta'_1 + \dots) \right] = \int d^n \Theta' \exp \left( -\sum_{j=1}^{\frac{n}{2}} \lambda_j \Theta'_{2j-1} \Theta'_{2j} \right).$$

Nun ist jede Grassmann-Funktion über ihre Taylor-Entwicklung definiert (vgl. (A.4)). Die Integration wirkt wie die Differentiation bei Grassmann-Variablen, so daß das Integral über  $n$ -Variable den  $n$ -ten Taylorkoeffizienten aus der Entwicklung der Funktion herauspräpariert:

$$\begin{aligned} \frac{(-1)^{\frac{n}{2}}}{\left(\frac{n}{2}\right)!} \int d^n \Theta (\lambda_1 \Theta'_1 \Theta'_2 + \lambda_2 \Theta'_3 \Theta'_4)^{\frac{n}{2}} &= (-1)^{\frac{n}{2}} \prod_{j=1}^{\frac{n}{2}} \lambda_j \int d^n \Theta \Theta'_1 \Theta'_2 \dots \Theta'_n \\ &= \sqrt{\det \mathbf{A}^{-1}}. \end{aligned} \quad (\text{A.30})$$

Der Faktor  $(n/2)!$  resultiert aus der Eigenschaft unserer Entwicklung jeweils ein Paar aufeinanderfolgender Variablen zu haben, daher wechselt das Vorzeichen nicht beim Vertauschen der Grassmann-Variablen, um eine gewünschte Reihenfolge herzustellen. So kann jede Kombination der Paare ohne Vorzeichenwechsel auf eine ausgesuchte Reihung gebracht werden. Die Anzahl der Möglichkeiten ist ein einfaches Problem aus der Kombinatorik, die Permutation ohne Wiederholung, also wie man  $n/2$  verschiedene Elemente auf  $n/2$  Plätze verteilt. Aus der Gleichung (A.29) folgt dann unser Ergebnis (A.26), das man in die folgende Form bringen kann:

$$\sqrt{\det \mathbf{A}} \exp\left(\frac{1}{2} \rho^T \mathbf{A} \rho\right) = \exp\left(\frac{1}{2} \text{Splog } \mathbf{A}\right) \exp\left(\frac{1}{2} \rho^T \mathbf{A} \rho\right). \quad (\text{A.31})$$

Dies begründet sich aus der Beziehung:

$$\det \mathbf{M} = \det (\mathbf{T} \mathbf{A} \mathbf{T}^{-1}) = \prod_{i=1}^n \lambda_i.$$

Das ist eine allgemeine Aussage der linearen Algebra, da durch die Ähnlichkeitstransformation  $\mathbf{T}$  die Matrix  $\mathbf{M}$  auf Diagonalgestalt gebracht worden ist. Zusammen mit der Tatsache, daß die Taylor-Entwicklung einer Matrizenfunktion sich auch mit der Transformation  $\mathbf{T}$  diagonalisieren läßt, ist die folgende Gleichung bewiesen:

$$\det (f(\mathbf{M})) = \prod_{i=1}^n f(\lambda_i).$$

Mit der Exponentialfunktion als wichtigstem Spezialfall dieser allgemeinen Formel erhalten wir:

$$\det (\exp(\mathbf{M})) = \prod_{i=1}^n \exp(\lambda_i) = \exp\left(\sum_{i=1}^n \lambda_i\right) = \exp(\text{Sp} \mathbf{M}). \quad (\text{A.32})$$

Die letzte Gleichung ist aufgrund der zyklischen Invarianz der Spurbildung gültig. Definiert man noch  $M = \ln A$  so erhält man Gleichung (A.31), da die beiden Funktionen sich invers zueinander verhalten.

Die Grassmann-Algebra kann man entsprechend komplex erweitern. Ein Satz von  $2n$ -Grassmann-Variablen genügt den Relationen:

$$\{\Theta_i, \Theta_j\} = 0, \quad \{\Theta_i^*, \Theta_j\} = 0, \quad \{\Theta_i^*, \Theta_j^*\} = 0. \quad (\text{A.33})$$

Die Operation der Konjugation erfüllt dabei die Relationen:

$$(\Theta_i)^* = \Theta_i^*, \quad (\text{A.34})$$

$$(\Theta_i^*)^* = \Theta_i, \quad (\text{A.35})$$

$$(\lambda \Theta_i)^* = \lambda^* \Theta_i^*, \quad (\text{A.36})$$

$$(\Theta_{i_1} \dots \Theta_{i_m})^* = \Theta_{i_m}^* \dots \Theta_{i_1}^*. \quad (\text{A.37})$$

Da ein Satz von  $2n$ -Variablen vorhanden ist, behandeln wir die Differentiation und Integration der  $\Theta_i, \Theta_i^*$  als voneinander unabhängig. Das Adjungierte eines Grassmann-Vektors besteht aus einer Transposition und einer anschließenden Konjugation:

$$\Theta^\dagger = \left( \begin{array}{c} \Theta_1 \\ \vdots \\ \Theta_n \end{array} \right)^\dagger = (\Theta_1, \dots, \Theta_n)^* = (\Theta_1^*, \dots, \Theta_n^*), \quad (\text{A.38})$$

$$\Theta^\dagger \mathbf{A} \Theta = \sum_{i,j} \Theta_i^* A_{ij} \Theta_j. \quad (\text{A.39})$$

Die Verallgemeinerung des Gaußschen Integrals (A.26) liegt auf der Hand:

$$\int d\Theta_1^* \dots d\Theta_n^* d\Theta_1 \dots d\Theta_n \exp(-\Theta^\dagger \mathbf{A} \Theta) = \det \mathbf{A}, \quad (\text{A.40})$$

und mit einer quadratischen Ergänzung  $\eta \mathbf{A}^{-1} \eta$ : ist das Gaußsche Integral samt eines Stromtermes berechenbar:

$$\int d^n \Theta^* d^n \Theta \exp(-\Theta^\dagger \mathbf{A} \Theta + \eta^\dagger \Theta + \Theta^\dagger \eta) = \det \mathbf{A} \exp(\eta^\dagger \mathbf{A}^{-1} \eta) \quad (\text{A.41})$$

## A.2 Analytische Resultate über Grassmann-Felder

Jetzt müssen wir noch den Grenzübergang kontinuierlicher Grassmann-Variablen  $\Theta_i \rightarrow \Theta(x)$ , geeignet formulieren, um die fermionischen Feldern zu beschreiben. Die grundlegenden Relationen dieser unendlich dimensionalen Grassmann-Algebra identifizieren wir mit:

$$\{\Theta(x), \Theta(y)\} = 0, \quad (\text{A.42})$$

und

$$\frac{\delta\Theta(x)}{\delta\Theta(y)} = \delta^{(4)}(x - y) \quad (\text{A.43})$$

in Analogie zu (A.1) und (A.5). Im kontinuierlichen Fall ist die Theorie im distributionellem und funktionalanalytischem Sinn zu deuten, die Ergebnisse (A.10), (A.11) sind dann einfach zu übernehmen:

$$\left\{ \frac{\delta}{\delta\Theta(x)}, \Theta(y) \right\} = \delta^{(4)}(x - y) \quad (\text{A.44})$$

$$\left\{ \frac{\delta}{\delta\Theta(x)}, \frac{\delta}{\delta\Theta(y)} \right\} = 0. \quad (\text{A.45})$$

Für ein beliebiges Element der Algebra gilt die funktionale Taylor-Entwicklung:

$$g(\Theta) = g^{(0)} + \int dx_1 g^{(1)}(x_1)\Theta(x_1) + \dots \quad (\text{A.46})$$

$$+ \int dx_1 \dots dx_n g^{(n)}(x_1, \dots, x_n)\Theta(x_1) \dots \Theta(x_n) + \dots \quad (\text{A.47})$$

Die Integrationsregeln über die Grassmann-Felder sind wiederum unseren diskreten Vorbe-  
trachtungen (A.16), (A.17) entlehnt:

$$\int d\Theta(x) 1 = 0, \quad (\text{A.48})$$

$$\int d\Theta(x) \Theta(x) = 1. \quad (\text{A.49})$$

Nun folgt aus den vorangegangenen Überlegungen, daß das Funktionalintegral:



$$\begin{aligned} \mathcal{Z} = & \oint \mathcal{D}\psi^* \oint \mathcal{D}\psi \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \left[ \int d^{D+1}x' \int d^{D+1}x \psi^*(\mathbf{x}) \mathcal{A}^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}') \right. \right. \\ & \left. \left. - \int d^{D+1}x [\psi^*(\mathbf{x}) \rho(\mathbf{x}) + \rho^*(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x})] \right] \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.50})$$

berechenbar ist:

$$\mathcal{Z} = \exp \left( [\text{Splog } \mathcal{A}^{-1}] + \frac{1}{\hbar} \int d^{D+1}x' \int d^{D+1}x \rho^*(\mathbf{x}) \mathcal{A}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \rho(\mathbf{x}) \right). \quad (\text{A.51})$$

Hierbei ist  $\mathcal{A}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$  die Umkehrung von  $\mathcal{A}^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ , in dem Sinne, daß:

$$\int d^{D+1}x'' \mathcal{A}^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'') \mathcal{A}(\mathbf{x}'', \mathbf{x}') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (\text{A.52})$$

Die Eigenwerte  $\lambda_{\mathbf{n}}$  von  $\mathcal{A}^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$  und  $\mathcal{A}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$  verhalten sich invers zueinander, also gilt:

$$\begin{aligned} \int d^{D+1}x' \int d^{D+1}x'' \mathcal{A}^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'') \mathcal{A}(\mathbf{x}'', \mathbf{x}') [\lambda_{\mathbf{n}} \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}')] &= \int d^{D+1}x'' \mathcal{A}^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'') \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}'') \\ &= \lambda_{\mathbf{n}} \int d^{D+1}x' \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) = \lambda_{\mathbf{n}} \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (\text{A.53})$$

Die Logarithmen dieser Eigenwerte summieren sich zum Spurlogarithmus von  $\mathcal{A}^{-1}$  auf:

$$\sum_{\mathbf{n}} \ln \lambda_{\mathbf{n}} = \text{Splog } \mathcal{A}^{-1}, \quad (\text{A.54})$$

dabei bestimmt sich  $\mathcal{Z}$  als:

$$\mathcal{Z} = \exp(\text{Splog } \mathcal{A}^{-1}) = \prod_{\mathbf{n}} \lambda_{\mathbf{n}} = \det \mathcal{A}^{-1}. \quad (\text{A.55})$$

Wir können aufgrund der Vollständigkeit des Orthonormalsystems von  $\mathcal{A}^{-1}$  die Funktionen entwickeln:

$$\psi^*(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{n}} c_{\mathbf{n}}^* \psi_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{x}), \quad \psi(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{n}} c_{\mathbf{n}} \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}). \quad (\text{A.56})$$

Die Funktionalintegrale führen wir mit dieser Zerlegung auf das Produkt gewöhnlicher Integrale zurück, und können sie dann mit Gleichung (A.40) ausrechnen.  $\mathcal{Z}$  schreibt sich dann als:

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z} &= \left\{ \prod_{\mathbf{n}} N_{\mathbf{n}} \int dc_{\mathbf{n}}^* \int dc_{\mathbf{n}} \right\} \exp \left( -\frac{1}{\hbar} \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'} \int d^{D+1}x \int d^{D+1}x' \psi_{\mathbf{n}'}^*(\mathbf{x}) \mathcal{A}^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}') \right) \\
&= \left\{ \prod_{\mathbf{n}} N_{\mathbf{n}} \int dc_{\mathbf{n}}^* \int dc_{\mathbf{n}} \right\} \exp \left( -\frac{1}{\hbar} \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'} \lambda_{\mathbf{n}} c_{\mathbf{n}'}^* c_{\mathbf{n}} \int d^{D+1}x \psi_{\mathbf{n}'}^*(\mathbf{x}) \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) \right) \\
&= \left\{ \prod_{\mathbf{n}} N_{\mathbf{n}} \int dc_{\mathbf{n}}^* \int dc_{\mathbf{n}} \right\} \exp \left( -\frac{1}{\hbar} \sum_{\mathbf{n}} \lambda_{\mathbf{n}} c_{\mathbf{n}}^* c_{\mathbf{n}} \right) = \prod_{\mathbf{n}} \lambda_{\mathbf{n}}. \tag{A.57}
\end{aligned}$$

Damit ist Gleichung (A.55) hergeleitet.

# Anhang B

## Hubbard-Stratonovich-Transformation

Eine wichtige Methode zur Untersuchung von Vielteilchensystemen im Rahmen des Funktionalintegralformalismus stellt die Hubbard-Stratonovich-Transformation dar. Dabei wird das ursprüngliche Funktionalintegral über die physikalischen Felder in ein Funktionalintegral über kollektive Hilfsfelder umgewandelt, das anschließend mit Hilfe der Sattelpunktsapproximation nichtperturbativ ausgewertet wird. Auf diese Weise lassen sich Resultate erzielen, die sowohl für kleine als auch große Werte der Kopplungskonstanten näherungsweise gültig sind.

### B.1 Physikalisches Modell

In diesem Abschnitt stellen wir die Methode der Hubbard-Stratonovich-Transformation am Beispiel der klassischen Statistik vor.

Um die Zustandsumme in der klassischen Statistik stellt sich als Integral über den Phasenraum des Boltzmann-Faktors dar:

$$Z = \frac{1}{(2\pi\hbar)^D} \int d^D x d^D p \exp(-\beta H(\mathbf{x}, \mathbf{p})) \quad (\text{B.1})$$

mit der Hamilton-Funktion:

$$H(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x}). \quad (\text{B.2})$$

Das Impuls-Integral ist als Gaußsches Integral auszuführen, und ergibt die thermische de

Broglie-Wellenlänge  $\lambda$ . Die Methode der Hubbard-Stratonovich-Transformation ist bei einem anharmonischen Potential vierter Ordnung anzuwenden, wobei das Potential  $\mathcal{O}(D)$ -symmetrisch ist, d.h. es ist invariant unter Drehungen im  $D$ -dimensionalen Raum.

$$Z = \frac{1}{\lambda^D} \int d^D x \exp(-\beta V(\mathbf{x})) \quad (\text{B.3})$$

mit der thermischen de Broglie-Wellenlänge:

$$\lambda = \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta\hbar}} \quad (\text{B.4})$$

und dem Potential

$$V(\mathbf{x}) = \frac{m}{2}\omega^2\mathbf{x}^2 + g(\mathbf{x}^2)^2. \quad (\text{B.5})$$

Damit schreibt sich die Zustandssumme als:

$$Z = \left(\frac{m}{2\pi\beta\hbar}\right)^{\frac{D}{2}} \int d^D x \exp\left\{-\beta \left[\frac{m}{2}\omega^2\mathbf{x}^2 + g(\mathbf{x}^2)^2\right]\right\}. \quad (\text{B.6})$$

Wählen wir  $\hbar = 1, \beta = 1, m = 1$ , so erhalten wir das Integralbeispiel, daß wir in den nächsten Abschnitten betrachten werden.

## B.2 Transformation bei reellen Integralen

Wir betrachten das mehrdimensionale Integral:

$$I_D(g) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^D} \int d^D x \exp\left[-\frac{1}{2}\omega^2\mathbf{x}^2 - g(\mathbf{x}^2)^2\right]. \quad (\text{B.7})$$

Die darin enthaltene Nichtlinearität stellen wir mit Hilfe eines Gaußschen Integrales über eine neue Hilfsvariable  $\sigma$  dar:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\sigma \exp(-\lambda\sigma^2 - \mu\sigma) = \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \exp\left(\frac{\mu^2}{4\lambda}\right). \quad (\text{B.8})$$

Hierzu identifizieren wir  $\lambda$  mit  $1/g$  und  $\mu$  mit  $2i\mathbf{x}^2$ , so daß (B.8) übergeht in:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\sigma \exp\left(-\frac{1}{g}\sigma^2 - 2i\mathbf{x}^2\sigma\right) = \sqrt{\pi g} \exp\left[-g(\mathbf{x}^2)^2\right]. \quad (\text{B.9})$$

Wir setzen nun (B.9) in (B.7) ein und vertauschen die Reihenfolge der Integration:

$$I_D(g) = \frac{1}{\sqrt{\pi g}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}^D} \int_{-\infty}^{+\infty} d\sigma \int d^D x \exp\left[-\frac{1}{g}\sigma^2 - \frac{1}{2}(\omega^2 + 4i\sigma)\mathbf{x}^2\right]. \quad (\text{B.10})$$

Die innere Quadratur können wir nun explizit ausführen, und erhalten:

$$I_D(g) = \frac{1}{\sqrt{\pi g}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\sigma \frac{\exp\left(-\frac{1}{g}\sigma^2\right)}{\sqrt{\omega^2 + 4i\sigma}^D}. \quad (\text{B.11})$$

Mittels der Beziehung  $z^{-\frac{D}{2}} = \exp\left(-\frac{D}{2}\ln z\right)$  schreiben wir das Integral (B.11) um zu:

$$I_D(g) = \frac{1}{\sqrt{\pi g}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\sigma \exp\left[-\frac{1}{g}\sigma^2 - \frac{D}{2}\ln(\omega^2 + 4i\sigma)\right], \quad (\text{B.12})$$

das nun in Sattelpunktsnäherung ausgewertet wird.

### B.3 Sattelpunktsnäherung

Um das Integral (B.12) einer systematischen Behandlung durch die Sattelpunktsapproximation zugänglich zu machen, definieren wir die Kopplungskonstante  $g$  um zu  $\tilde{g} = gD$ , und erhalten

$$I_D(g) = \frac{1}{\sqrt{\pi\tilde{g}/D}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\sigma \exp[-Df(\sigma)], \quad (\text{B.13})$$

mit der Funktion

$$f(\sigma) = \frac{1}{\tilde{g}}\sigma^2 + \frac{1}{2}\ln(\omega^2 + 4i\sigma). \quad (\text{B.14})$$

Aus der  $D$ -Abhängigkeit der Exponentialfunktion folgt, daß für große  $D$  nur an der Stelle des Sattelpunktes ein wesentlicher Beitrag zum Integral geleistet wird. Im Limes  $D \rightarrow \infty$

ist dann das Sattelpunktsresultat sogar exakt. Hierzu bilden wir zunächst die ersten beiden Ableitungen von  $f(\sigma)$ :

$$f^{(1)}(\sigma) = \frac{2}{\tilde{g}}\sigma + \frac{2i}{\omega^2 + 4i\sigma}, \quad (\text{B.15})$$

$$f^{(2)}(\sigma) = \frac{2}{\tilde{g}} + \frac{8}{(\omega^2 + 4i\sigma)^2}. \quad (\text{B.16})$$

Die Nullstelle der ersten Ableitung (B.15) führt auf eine quadratische Gleichung mit den beiden Lösungen:

$$\sigma_0^\mp = \frac{i\omega^2}{8} \left( 1 \mp \sqrt{1 + \frac{16\tilde{g}}{\omega^4}} \right). \quad (\text{B.17})$$

Da wir hierbei eine quadratische Gleichung gelöst haben, müssen wir uns zwischen zwei möglichen Sattelpunkten entscheiden. Dazu werden wir die mathematischen Grundlagen der Sattelpunktsapproximation kurz betrachten, wie in [35] dargelegt. Die Auswertung der Exponentialfunktion am Sattelpunkt benötigt die Konstanz des Imaginärteils ihres Argumentes. Die zweite Voraussetzung ist ein Maximum des Realteils der Funktion im Exponenten. Die erste Bedingung führt uns auf:

$$\text{Im}[f(\sigma)] = 2\text{Im}\sigma\text{Re}\sigma - \frac{1}{2} \arctan\left(\frac{4\text{Re}\sigma}{\omega^2 - 4\text{Im}\sigma}\right). \quad (\text{B.18})$$

Für Gleichung (B.18) bietet sich als triviale Lösung einfach  $\text{Re}\sigma = 0$  an. Dann verschwindet der Imaginärteil des Sattels bei  $\sigma_0$ . Die Extremalisierung des Sattelpunktrealteils ergibt genau die beiden Lösungen von (B.15) für  $\text{Im}\sigma$ . Die Werte von  $\text{Im}\sigma$  werden dann in den Realteil von (B.14) eingesetzt. Wir erhalten dabei die Extremwerte des Realteils:

$$\begin{aligned} \text{Re}[f(\sigma)] &= \frac{1}{4} + \frac{1}{2} \ln 2 - \ln(\omega) \\ &\quad - \frac{1}{2} \left[ \frac{1}{1 + \sqrt{1 + \frac{16\tilde{g}}{\omega^4}}} + \ln\left(1 + \sqrt{1 + \frac{16\tilde{g}}{\omega^4}}\right) \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

Die zweite Lösung ergibt sich entsprechend durch Invertierung der Vorzeichen vor dem Bruch und im Logarithmus. Letzterer aber produziert für die zweite Lösung keinen vernünftigen Wert, da das Argument des Logarithmus negativ werden würde, und somit der Realteilausdruck nicht definiert wäre. Der Grund dafür liegt einfach auf der Hand, der Realteil von  $f(\sigma)$  hat bei der zweiten Lösung ein Minimum und darf daher nicht bei der Sattelpunktsapproximation verwendet werden. Wenn man die zweite Ableitung des Realteils von  $f(\sigma)$  bildet

und die beiden Lösung von  $\sigma_0$  einsetzt, erhalten wir  $\operatorname{Re}^{(2)}f(\sigma_0) < 0$  für die erste Lösung und  $\operatorname{Re}^{(2)}f(\sigma_0) > 0$  für die zweite Lösung. Das rechtfertigt unsere Annahme, nur die ersten Lösung für  $\sigma_0$  zu verwenden. Die eigentliche Berechnung der Sattelpunktsnäherung geschieht mittels der ersten Glieder der Taylor-Reihe.

Eine Taylor-Entwicklung von  $f(\sigma)$  um den Sattelpunkt  $\sigma_0$  überführt das Integral (B.13) in:

$$I_D(\tilde{g}) = \sqrt{\frac{D}{\pi\tilde{g}}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\sigma \exp\left(-D \left[ f(\sigma_0) + \frac{1}{2}f^{(2)}(\sigma_0)(\sigma - \sigma_0)^2 + \dots \right]\right). \quad (\text{B.20})$$

Die Auswertung des  $\sigma$ -Integrales führt auf:

$$I_D(\tilde{g}) = \exp[-F_D(\tilde{g})], \quad (\text{B.21})$$

mit:

$$F_D(\tilde{g}) = Df(\sigma_0) + \frac{1}{2} \ln \left[ \frac{\tilde{g}}{2} f^{(2)}(\sigma_0) \right]. \quad (\text{B.22})$$

Setzt man  $\sigma_0$  in (B.22) ein, so erhält man das gewünschte Resultat der Sattelpunktsnäherung. Wir wollen dies explizit nicht ausführen, sondern wir werden das Ergebnis in eine Stark- und eine Schwachkopplungsreihe entwickeln.

## B.4 Schwachkopplungsreihe

Für kleine Kopplungskonstanten  $\tilde{g}$  können wir den Wurzel Ausdruck in (B.17) Taylor entwickeln und erhalten:

$$\sigma_0 = \frac{\tilde{g}}{\omega^2} - \frac{4\tilde{g}^2}{\omega^6} + \dots \quad (\text{B.23})$$

Auch der Funktionswert  $f(\sigma_0)$  am Sattelpunkt  $\sigma = \sigma_0$  läßt sich für kleine Kopplungskonstanten  $\tilde{g}$ , entwickeln, was gemäß (B.23) kleinen  $\sigma_0$  entspricht. Die Entwicklung führt auf:

$$f(\sigma_0) = \frac{\sigma^2}{\tilde{g}} + \ln(\omega) + \frac{2i\sigma_0}{\omega^2} + \frac{4\sigma^2}{\omega^4} + \dots \quad (\text{B.24})$$

Nun ist der Sattelpunkt  $\sigma_0$  aus (B.23) in die Taylor-Reihe (B.24) einzusetzen, und nach Potenzen von  $\tilde{g}$  zu sortieren:

$$f(\sigma_0) = \ln(\omega^2) + \frac{\tilde{g}}{\omega^4} - \frac{4\tilde{g}^2}{\omega^8} + \dots \quad (\text{B.25})$$

Für Gleichung (B.16) ist auf die selbe Art vorzugehen und wir erhalten dann:

$$f^{(2)}(\sigma_0) = \frac{2}{\tilde{g}} + \frac{8}{\omega^4} - \frac{64\tilde{g}}{\omega^8} + \dots \quad (\text{B.26})$$

Als nächster Schritt ist der Logarithmus in (B.22) zu entwickeln:

$$\ln \left[ \frac{\tilde{g}}{2} f^{(2)}(\sigma_0) \right] = \frac{4\tilde{g}}{\omega^4} - \frac{40\tilde{g}^2}{\omega^8} + \dots \quad (\text{B.27})$$

Dieses Ergebnis ist gemäß (B.22) mit Gleichung (B.25) zu addieren:

$$F_D(\tilde{g}) = D \ln(\omega) + (D+2) \frac{\tilde{g}}{\omega^4} - (D+5) \frac{4\tilde{g}}{\omega^8} + \dots \quad (\text{B.28})$$

Wir vergleichen nun dieses Ergebnis der Sattelpunktsapproximation mit einer störungstheoretischen Berechnung. Hierzu entwickeln wir im Integral (B.7) den Anteil der Exponentialfunktion in Potenzen von  $g$ , da wir annehmen, daß die Kopplungsstärke klein ist:

$$I_D(g) = \int_{-\infty}^{+\infty} d^D x \left[ 1 - g(\mathbf{x}^2)^2 + \frac{1}{2}g^2(\mathbf{x}^2)^4 + \dots \right] \exp\left(-\frac{1}{2}\omega^2\mathbf{x}^2\right). \quad (\text{B.29})$$

Die in dieser Reihe stehenden Gauß-Integrale sind allesamt analytisch berechenbar, da eine Ableitung von  $I_D(g)$  nach  $\omega^2$  jedensmal die Potenz vor der Exponentialfunktion von  $\mathbf{x}^{2n}$  auf  $\mathbf{x}^{2n+2}$  erhöht. Somit können wir die Integrale auf das Gauße zurückführen.

$$\int d^D x (\mathbf{x}^2)^n \exp\left(-\frac{1}{2}\omega^2\mathbf{x}^2\right) = (-2)^n \frac{d^n}{d(\omega^2)^n} \int d^D x \exp\left(-\frac{1}{2}\omega^2\mathbf{x}^2\right) = (-2)^n \frac{d^n}{d(\omega^2)^n} \sqrt{\frac{2\pi}{\omega^2}}^D.$$

Als nächstes müssen wir den Logarithmus dieser Reihe nach Potenzen von  $g$  entwickeln, das liefert uns mit  $\tilde{g} = gD$  das Ergebnis:

$$F_D(\tilde{g}) = D \ln(\omega) + (D+2) \frac{\tilde{g}}{\omega^4} - \left(D+5 + \frac{6}{D}\right) \frac{\tilde{g}^2}{\omega^8} + \dots \quad (\text{B.30})$$



Vergleichen wir das Ergebnis der Störungsrechnung (B.30) mit unserem Sattelpunktsresultat (B.28), so erkennen wir das  $F_D(\tilde{g})$  in den Ordnungen  $\mathcal{O}(D^0)$  und  $\mathcal{O}(D^1)$  übereinstimmen. Aber die Sattelpunktsapproximation reproduziert nicht mehr die Ordnung  $\mathcal{O}(D^{-1})$ . Diese ist durch den Abbruch der Taylor-Entwicklung von  $f(\sigma)$  nach dem zweiten Glied (vgl. (B.20)) nicht in unserem Ergebnis (B.28) enthalten.

Nun wollen wir die Berechnung der Ordnung  $\mathcal{O}(D^{-1})$  zumindest skizzieren. Die Exponentialfunktion, die die höheren Taylor-Koeffizienten enthält, wurde bei unseren Betrachtungen einfach nicht berücksichtigt. Wenn aber die Exponentialfunktion auch einer Taylor-Entwicklung unterzogen wird, ist die Mitnahme höherer Ordnungen möglich.

Dazu müssen nur Gauß-Integrale ausgerechnet werden, wie sie auch in der Störungsreihe aufgetaucht sind. Um  $\mathcal{O}(D^{-1})$  zu erhalten lösen wir:

$$I_D(\tilde{g}) = \sqrt{\frac{D}{\pi\tilde{g}}} e^{-Df(\sigma_0)} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{\sigma} \exp\left(-\frac{D}{2}f^{(2)}(\sigma_0)\tilde{\sigma}^2\right) \left(1 - \frac{Df^{(3)}(\sigma_0)}{6}\tilde{\sigma}^3 - \frac{Df^{(4)}(\sigma_0)}{24}\tilde{\sigma}^4 - \dots + \frac{1}{2}\frac{D^2[f^{(3)}(\sigma_0)]^2}{36}\tilde{\sigma}^3 + \dots\right) \quad (\text{B.31})$$

Die weiteren Glieder tragen nur zu den Ordnungen  $\mathcal{O}(D^{-k})$  mit  $k > 1$  bei, da die Fluktuationsvariable  $\tilde{\sigma}$  von der Ordnung  $D^{-1/2}$  ist. Damit sind die restlichen Beiträge der Taylor-Entwicklung nicht relevant. Die Annahme über die Fluktuations-Variable begründen wir, indem wir die mittlere quadratische Abweichung bzgl. unseres Ensembles bilden. Wir haben dann die folgenden Gleichung zu berechnen:

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\sigma}^2 \rangle &= \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{\sigma} \tilde{\sigma}^2 \exp\left(-\frac{D}{2}f^{(2)}(\sigma_0)\tilde{\sigma}^2\right) = -\frac{1}{N} \frac{d}{d\kappa} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{\sigma} \exp(-\kappa\tilde{\sigma}^2) \Big|_{\kappa=\frac{D}{2}f^{(2)}(\sigma_0)} \\ &= -\frac{1}{N} \frac{d}{d\kappa} \sqrt{\frac{\pi}{\kappa}} = \frac{1}{N} \sqrt{\frac{2\pi}{Df^{(2)}(\sigma_0)}} \frac{1}{Df^{(2)}(\sigma_0)} \Big|_{\kappa=\frac{D}{2}f^{(2)}(\sigma_0)} = \frac{1}{f^{(2)}(\sigma_0)} \frac{1}{D}. \end{aligned} \quad (\text{B.32})$$

Also ist  $\tilde{\sigma}$  proportional zu  $D^{-1/2}$ , und unsere Annahme war gerechtfertigt.

## B.5 Starkkopplungsreihe

Wir folgen der Vorgehensweise des vorherigen Kapitels, entwickeln aber diesmal die entsprechenden Gleichungen nicht für kleine sondern für große Kopplungskonstanten  $\tilde{g}$ . Dementsprechend erhalten wir für den Sattelpunkt (B.17) die Starkkopplungsreihe:

$$\sigma_0 = \frac{\sqrt{\tilde{g}}}{2} \left(1 - \frac{\omega^2}{\sqrt{\tilde{g}}} + \dots\right). \quad (\text{B.33})$$

Für die beiden Funktionen  $f(\sigma)$ ,  $f^{(2)}(\sigma)$  ist die Starkkopplungsentwicklung gegeben durch:

$$f(\sigma_0) = \frac{1}{4} \left( \ln(\tilde{g}) + 2 \ln 2 - 1 + \frac{\omega^2}{\sqrt{\tilde{g}}} + \dots \right), \quad (\text{B.34})$$

$$f^{(2)}(\sigma_0) = \frac{4}{\tilde{g}} \left( 1 - \frac{\omega^2}{\sqrt{\tilde{g}}} + \dots \right). \quad (\text{B.35})$$

Der Beitrag des Logarithmus in (B.22) ergibt:

$$\ln \left( \frac{\tilde{g}}{2} f^{(2)}(\sigma_0) \right) = \ln 2 - \frac{\omega^2}{4\tilde{g}} + \dots \quad (\text{B.36})$$

Die Summe von (B.34) und (B.36) ist nach (B.22) die gesuchte Starkkopplungsreihe:

$$F_D(\tilde{g}) = \frac{D}{4} \ln(\tilde{g}) + \frac{1}{2} (D+1) \ln 2 - \frac{D}{4} + \frac{1}{4} \left( D - \frac{1}{2} \right) \frac{\omega^2}{\sqrt{\tilde{g}}} + \dots \quad (\text{B.37})$$

Dies vergleichen wir nun mit der exakten Starkkopplungsentwicklung. Hierzu wird (B.7) in  $D$ -dimensionalen Kugelkoordinaten ausgewertet. Dabei ist wegen der Symmetrie des Integranden der Winkelanteil trivial zu integrieren. In dem verbleibenden  $r$ -Integral substituieren wir  $r = g^{-1/4}x$ , so daß (B.7) übergeht in:

$$I_D(g) = \frac{g^{-D/4}}{2^{D/2-1} \Gamma\left(\frac{D}{2}\right)} \int_0^\infty dx x^{D-1} \exp\left(-\frac{1}{2}g^{-1/2}\omega^2 x^2 - x^4\right). \quad (\text{B.38})$$

Nun entwickeln wir den quadratischen Anteil der Exponentialfunktion und substituieren  $x = z^{1/4}$ . Dies überführt (B.38) in:

$$I_D(g) = \frac{g^{-D/4}}{2^{D/2+1}} \frac{\Gamma\left(\frac{D}{4}\right)}{\Gamma\left(\frac{D}{2}\right)} \left( 1 - \frac{\Gamma\left(\frac{D}{4} + \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{D}{4}\right)} \frac{\omega^2}{2\sqrt{g}} + \dots \right). \quad (\text{B.39})$$

Die Gamma-Funktion ist an dieser Stelle mit der Stirling-Formel zu approximieren:

$$\Gamma(y) = \sqrt{2\pi} e^{-y} y^{y-\frac{1}{2}} \left( 1 - \frac{1}{12y} + \dots \right). \quad (\text{B.40})$$

Wir vernachlässigen in allen Quotienten der Gamma-Funktion jeweils den Bruchterm der beiden Reihen. Für den ersten Quotienten ist dies ein Fehler der Ordnung  $\mathcal{O}(D^{-1})$  für jeden weiteren sogar nur der Ordnung  $\mathcal{O}(D^{-2})$ .

Dann gilt für den ersten Quotienten:

$$\frac{\Gamma\left(\frac{D}{4}\right)}{\Gamma\left(\frac{D}{2}\right)} = \sqrt{2}e^{\frac{D}{4}}D^{-\frac{D}{4}}, \quad (\text{B.41})$$

und für den Korrekturterm:

$$\frac{\Gamma\left(\frac{D}{4} + \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{D}{4}\right)} = \frac{\sqrt{D}}{2} \sqrt{\frac{\left(1 + \frac{2}{D}\right)^{\frac{D}{2}}}{e}}. \quad (\text{B.42})$$

Aber das Produkt  $(1 + 2/D)^{D/2}$  nähert sich streng monoton wachsend von unten gegen seinen Grenzwert  $e$ . Um den maximalen Fehler abschätzen zu können, benötigen wir eine geeignete monoton fallende Folge, die von oben gegen die Eulersche Zahl konvergiert:

$$\frac{\sqrt{D}}{2} \sqrt{\frac{\left(1 + \frac{2}{D}\right)^{\frac{D}{2}}}{e}} = \frac{\sqrt{D}}{2} \sqrt{\frac{\left(1 + \frac{2}{D}\right)^{\frac{D}{2}}}{\left(1 + \frac{2}{D}\right)^{\frac{D+1}{2}}}} = \left(1 + \frac{2}{D}\right)^{-\frac{1}{4}} = 1 - \frac{1}{2D} + \dots \quad (\text{B.43})$$

Setzen wir die Gleichungen (B.41)-(B.43) in (B.39) ein, und nehmen dann den negativen Logarithmus, so erhalten wir die Starkkopplungsreihe (B.37) in den Ordnungen  $\mathcal{O}(D^0)$  und  $\mathcal{O}(D^1)$ .

Wollen wir weitere Ordnungen bei unserer Sattelpunktsapproximation mitnehmen, haben wir wie im vorigen Abschnitt B.4 über die Schwachkopplungsreihe vorzugehen. Das heißt unsere Sattelpunktsnäherung ist in beiden Entwicklungen, der Stark- und Schwachkopplungsreihe, gültig. Die getrennte Behandlung resultiert allein aus der Taylor-Entwicklung der Wurzel aus Gleichung (B.17).

Somit ist aber das Sattelpunktsresultat (ohne Wurzel-Entwicklung) nicht nur in den Limites schwacher und starker Kopplung gültig, sondern auch in dem dazwischen liegenden Bereich, das bedeutet aber, daß die Sattelpunktsnäherung ein nichtperturbatives Resultat ist.

Unsere Ergebnisse gelten also für alle Werte der Kopplungskonstanten  $g$ .



# Danksagung

Ich danke Professor Dr. Robert Graham und Dr. habil. Axel Pelster, erstgenanntem für die freundliche Aufnahme in seine Arbeitsgruppe, insbesondere für die Bereitstellung eines Büroplatzes. Der Dialog und die Betreuung durch Herrn Pelster haben mir das Thema vorbildlich nahe gebracht.

Meinen Eltern bin ich zu Dank verpflichtet, da Sie mich immer selbstlos unterstützt haben, auch wenn es Ihnen manchmal schwer gefallen sein muß. Sie haben die Hoffnung auf eine glückliche und erfüllte Zukunft für meine Schwester und mich niemals fallen gelassen.

Durch diese Unterstützung ist mir das Studium erst ermöglicht worden. Motiviert durch Ihre stete und positive Anteilnahme, habe ich mein Studium zu Ende bringen können.

Euer für alle Zeiten dankbare Sohn.



# Literaturverzeichnis

- [1] B. de Marco and D.S. Jin, *Onset of Fermi Degeneracy in a Trapped Atomic Gas*, Science **285**, 1703 (1999).
- [2] W. Ketterle, D.M. Stamper-Kurn, H.-J. Miesner, J. Stenger, M.R. Andrews, and S. Inouye, *Observation of Feshbach Resonances in a Bose-Einstein Condensate*, Nature **392**, 151 (1998).
- [3] M.H. Anderson, J.R. Ensher, M.R. Matthews, C.E. Wieman, and E.A. Cornell, *Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Vapor*, Science **269**, 198 (1995).
- [4] K.B. Davis, M.-O. Mewes, M.R. Andrews, N.J. van Druten, D.S. Durfee, D.M. Kurn, and W. Ketterle, *Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms*, Phys. Rev. Lett. **75**, 3069 (1995).
- [5] C.C. Bradley, C.A. Sackett, J.J. Tollett, and R.G. Hulet, *Evidence of Bose-Einstein Condensation in an Atomic Gas with Attractive Interactions*, Phys. Rev. Lett. **75**, 1687 (1995).
- [6] D.G. Fried, T. Killian, L. Willmann, D. Landhuis, S.C. Moss, D. Kleppner, and T.J. Greytak, *Bose-Einstein Condensation of Atomic Hydrogen*, Phys. Rev. Lett. **81**, 3811 (1998).
- [7] A. Robert, O. Sirjean, A. Browaeys, J. Poupard, S. Nowak, D. Boiron, C.I. Westbrook, and A. Aspect, *A Bose-Einstein Condensate of Metastable Atoms* Science **292**, 461 (2001).
- [8] F. Pereira Dos Santos, J Léonard, J. Wang, C.J. Barrelet, F. Perales, E. Rasel, C.S. Unnikrishnan, M. Leduc, and C. Cohen-Tannoudji, *Bose-Einstein Condensation of Metastable Helium* Phys. Rev. Lett. **86**, 3459 (2001).
- [9] G. Modugno, G. Ferrari, G. Roati, R.J. Brecha, A. Simoni, and M. Inguscio, *Bose-Einstein Condensation of Potassium Atoms with Sympathetic Cooling*, Science **294**, 1320 (2001).
- [10] T. Weber, J. Herbig, M. Mark, H.-C. Nägerl, and R. Grimm, *Bose-Einstein Condensation of Cesium*, Science **299**, 232 (2003).

- [11] Y. Takasu, K. Maki, K. Komori, T. Takano, K. Honda, M. Kumakura, T. Yabuzaki, and Y. Takahashi, *Spin-Singlet Bose-Einstein Condensation of Two-Electron Atoms*, Phys. Rev. Lett. **91**, 040404 (2003).
- [12] A. Griesmaier, J. Werner, S. Hensler, J. Stuhler, and T. Pfau, *Bose-Einstein Condensation of Chromium*, Phys. Rev. Lett. **94**, 160401 (2005).
- [13] M. Greiner, C.A. Regal, and D.S. Jin, *Emergence of a Molecular Bose-Einstein Condensate from a Fermi Gas*, Science **426**, 537 (2003).
- [14] M.W. Zwierlein, C.A. Stan, C.H. Schunk, S.M.F. Raupach, A.J. Kerman, and W. Ketterle, *Condensation of Pairs of Fermionic Atoms near a Feshbach Resonance*, Phys. Rev. Lett. **92**, 120403 (2004).
- [15] C.A. Regal and D.S. Jin, *Measurement of Positive and Negative Scattering Length in a Fermi Gas of Atoms*, Phys. Rev. Lett. **90**, 230404 (2003).
- [16] C.A. Regal, C. Ticknor, J.L. Bohn, and D.S. Jin, *Creation of Ultracold Molecules from a Fermi Gas of Atoms*, Science **424**, 47 (2003).
- [17] K.E. Strecker, G.B. Partridge, and R.G. Hulet, *Conversion of an Atomic Fermi Gas to a Long-Lived Molecular Bose Gas*, Phys. Rev. Lett. **91**, 080406 (2003).
- [18] F.A. Berezin and M. Marinov *Classical spin and Grassmann algebra* JETP Lett. **21**, 678 (1975).
- [19] C.A.R. Sá de Melo, M. Randeria, and J.R. Engelbrecht, *Crossover from BCS to Bose-Superconductivity: Transition Temperature and Time-Dependent Ginzburg-Landau Theory*, Phys. Rev. Lett. **71**, 3202 (1993).
- [20] Q. Chen, J. Stajic, S. Tan, and K. Levin, *BCS-BEC Crossover: From High Temperature Superconductors to Ultracold Superfluids*, Phys. Rep. **412**, 1 (2005).
- [21] P. Nozières and S. Schmitt-Rink, *Bose Condensation in an Attractive Fermion Gas: From Weak to Strong Coupling Superconductivity*, J. Low Temp. Phys. **59**, 195 (1985).
- [22] C.A. Regal, M. Greiner, and D.S. Jin, *Observation of Resonance Condensation of Fermionic Atom Pairs*, Phys. Rev. Lett. **92**, 040403 (2004).
- [23] T. Bourdel, L. Khaykovich, J. Cubizolles, J. Zhang, F. Chevy, M. Teichmann, L. Tarruell, S.J.J.M.F. Kokkelmans, and C. Salomon, *Experimental Study of the BEC-BCS Crossover Region in Lithium 6*, Phys. Rev. Lett. **93**, 050401 (2004).
- [24] K.M. O'Hara, S.L. Hemmer, M.E. Gehm, S.R. Granadem, and J.E. Thomas, *Observation of a Strongly Interacting Degenerate Fermi Gas of Atoms*, Science **298**, 2179 (2002).



- [25] J. Cubizolles, T. Bourdel, S.J.J.M.F. Kokkelmans, G.V. Shlyapnikov, and C. Salomon, *Production of Long-Lived Ultracold Li<sub>2</sub> Molecules from a Fermi Gas*, Phys. Rev. Lett. **91**, 240401 (2003).
- [26] S. Joachim, M. Bartenstein, A. Altmeyer, G. Hendl, C. Chin, J. Hecker Denschlag, and R. Grimm, *Pure Gas of Optically Trapped Molecules Created from Fermionic Atoms* Phys. Rev. Lett. **91**, 240402 (2003).
- [27] M.E. Gehm, S.L. Hemmer, S.R. Granade, K.M. O'Hara, and J.E. Thomas, *Mechanical Stability of a Strongly Interacting Fermi Gas of Atoms*, Phys. Rev. A **68**, 011401 (2003).
- [28] H. Kleinert, *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics, and Financial Markets*, Third Edition, World Scientific (2004).
- [29] C.A.R. Sá de Melo, M. Randeria, and J.R. Engelbrecht, *BCS to Bose Crossover: Broken-Symmetry State*, Phys. Rev. B **55**, 15153 (1997).
- [30] A. Pelster, *Bose-Einstein-Kondensation*, Vorlesungsskript im Sommersemester 2004, [www.theo-phys.uni-essen.de/tp/ags/pelster\\_dir/SS04/skript.pdf](http://www.theo-phys.uni-essen.de/tp/ags/pelster_dir/SS04/skript.pdf).
- [31] I.S. Gradshteyn and I.M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series, and Products*, Sixth Edition, Academic Press (2000).
- [32] W. Weizel, *Lehrbuch der Theoretischen Physik 1.Band*, 2. Auflage, Springer Verlag (1955).
- [33] H. Feshbach, *Unified Theory of Nuclear Reactions*, Ann. of Phys. **5**, 357 (1958).
- [34] H. Feshbach, *A Unified Theory of Nuclear Reactions*, Ann. of Phys. **19**, 287 (1962).
- [35] K. Jänich, *Analysis für Physiker und Ingenieure*, 3. Auflage, Springer-Verlag (1995).
- [36] R.A. Duine and H.T.C. Stoof, *Atom-Molecule Coherence in Bose Gases*, Phys. Rep. **396**, 115 (2004).
- [37] W. Greiner and J. Reinhardt, *Feldquantisierung*, 1. Auflage, Verlag Harri Deutsch (1993).
- [38] J.N. Milstein, S.J.J.M.F. Kokkelmans, and M.J. Holland, *Resonance Theory of the Crossover from Bardeen-Cooper-Schrieffer Superfluidity to Bose-Einstein Condensation in a Dilute Fermi Gas*, Phys. Rev. A **66**, 043604 (2002).
- [39] S.J.J.M.F. Kokkelmans, J.N. Milstein, M.L. Chiofalo, R. Walser, and M.J. Holland, *Resonance Superfluidity: Renormalization of Resonance Scattering Theory*, Phys. Rev. A **65**, 053617 (2002).
- [40] E. Timmermans, P. Tommasini, M. Hussein, and A. Kerman, *Feshbach Resonances in Atomic Bose-Einstein Condensates*, Phys. Rep. **315**, 199 (1999).

- [41] Y. Ohashi and A. Griffin, *BCS-BEC Crossover in a Gas of Fermi Atoms with a Feshbach Resonance*, Phys. Rev. Lett. **89**, 130402 (2002).
- [42] Y. Ohashi and A. Griffin, *Superfluidity and Collective Modes in a Uniform Gas of Fermi Atoms with a Feshbach Resonance*, Phys. Rev. A **67**, 063612 (2003).