

POLITECHNIKA WARSZAWSKA

Wydział Fizyki

ROZPRAWA DOKTORSKA

mgr inż. Gabriel Robert Wlazłowski

**Zbadanie właściwości rozrzedzonego gazu silnie oddziałujących
fermionów metodą Monte Carlo**

Promotor
dr hab. Piotr Magierski, profesor PW

Warszawa 2010

Podziękowania

Pragnę serdecznie podziękować mojemu promotorowi dr. hab. Piotrowi Magierskiemu za nieustającą opiekę merytoryczną. Szczególnie dziękuję za szereg odbytych dyskusji naukowych, które stanowiły inspirację do stworzenia tej pracy.

Gorąco dziękuję mojej kochanej żonie Maryli za ciągłe wsparcie bez którego napisanie tej pracy nie byłoby możliwe. Szczególnie dziękuję za niezliczoną ilość uwag dotyczących stylistyki tekstu, które bez wątpienia uczyniły tę pracę bardziej przyjazną dla czytelnika.

Chciałbym również serdecznie podziękować moim rodzicom za wsparcie, zarówno duchowe jak i materialne, które pozwoliło mi częściowo zapomnieć o problemach dnia codziennego.

Dziękuję za wsparcie finansowe otrzymane od Ministerstwa Nauki i Szkolnictwa Wyższego w ramach kontraktów numer N N202 328234 i N N202 110236 oraz za finansowanie otrzymane w ramach grantów dziekańskich PW numer 503G 1050 0015 008 i 503G 1050 0027 000. Dziękuję Interdyscyplinarnemu Centrum Modelowania Matematycznego i Komputerowego (ICM) Uniwersytetu Warszawskiego za udostępnienie swoich mocy obliczeniowych w ramach grantu numer G31-12. Dziękuję również prof. Aurelowi Bulgacowi z Wydziału Fizyki Uniwersytetu Stanu Waszyngton w Seattle za umożliwienie wykonywania części obliczeń na klastrze komputerowym „tiger”. Praca naukowa współfinansowana ze środków Europejskiego Funduszu Społecznego i Budżetu Państwa w ramach Zintegrowanego Programu Operacyjnego Rozwoju Regionalnego, Działania 2.6 „Regionalne Strategie Innowacyjne i transfer wiedzy” projektu własnego Województwa Mazowieckiego „Mazowieckie Stypendium Doktoranckie”.

Warszawa, styczeń 2010 r.

Gabriel Wlazłowski



Streszczenie

W rozprawie przedstawiono wybrane aspekty wiedzy dotyczącej fizyki silnie oddziałujących gazów fermionowych. Dokonano przeglądu najważniejszych podejść teoretycznych, które zostały dotychczas wykorzystane do opisu gazu silnie skorelowanych fermionów. Dokładnie przedstawiono formalizm metody kwantowego Monte Carlo, zdefiniowanego dla temperatur skończonych. Najważniejszy element tego formalizmu stanowi transformacja Hubbarda-Stratonovicha, która została dokładnie opisana dla przypadku oddziaływania o zerowym zasięgu efektywnym wraz z autorskim rozszerzeniem na przypadek ze skończonym zasięgiem efektywnym. Dyskutowany jest formalizm obliczeń na sieci wraz z autorską metodą rozwiązywania zagadnienia rozproszeniowego w sytuacji, gdy problem zdefiniowany jest w dyskretnym pudle o boku L . Pokazano, że w ramach opisanego formalizmu możliwe jest wykonanie w pełni nieperturbacyjnych obliczeń dla zimnych gazów atomowych i rozrzedzonej materii neutronowej.

Opracowano metodologię wyznaczania funkcji spektralnej poprzez wykonanie przedłużenia analitycznego temperaturowej funkcji Greena z osi czasów urojonych do osi czasów rzeczywistych, za pomocą metody SVD i metody maksymalnej entropii. Określono możliwości rekonstrukcyjne funkcji spektralnej, które okazały się być wystarczające do wyznaczenia funkcji spektralnej i w konsekwencji właściwości nadciekłych rozważanych układów.

Przedstawiono wyniki symulacji numerycznych dla zimnych gazów atomowych w reżimie unitarnym jak również dla rozrzedzonej materii neutronowej o gęstości 0.003 fm^{-3} . Dla gazu zimnych atomów stwierdzono istnienie tzw. fazy „pseudoszczeliny”, w której układ nie jest w stanie nadciekłym, pomimo że nadal istnieją w nim pary Coopera. Otrzymane wyniki w połączeniu z bieżącą wiedzą prowadzą do wniosku, że gaz zimnych atomów nie jest nadprzewodnikiem typu BCS, lecz należy go uznać za nowy rodzaj nadprzewodnika o właściwościach bardzo podobnych do nadprzewodników wysokotemperaturowych.

Dla rozrzedzonej materii neutronowej wyznaczono zależności całkowitej energii oraz

potencjału chemicznego w funkcji temperatury. Określono temperaturę krytyczną przejścia fazowego jak również temperaturową ewolucję parametrów opisujących widmo wzbudzeń kwazicząstek (szczelina energetyczna, masa efektywna, średni potencjał jednocząstkowy). Chociaż nie stwierdzono w sposób jednoznaczny istnienia fazy „pseudoszczeliny” dla tego układu, to otrzymane wyniki wskazują, że układ ten również nie jest nadprzewodnikiem typu BCS. Świadczy o tym otrzymana w wyniku symulacji numerycznych duża wartość stosunku $\Delta/T_c \approx 3.2$, która jest około dwukrotnie większa niż wynika to z teorii BCS.

Abstract

In this thesis the selected aspects concerning physics of strongly interacting fermionic gases are summarized together with a comprehensive review of the most important theoretical approaches, used to describe properties of strongly correlated fermions. In particular the formalism of Quantum Monte Carlo method for finite temperatures is presented in detail. The most important ingredient of this approach is the Hubbard-Stratonovich transformation, which is discussed both for the zero effective range interaction and author's extension for the case of the finite effective range interaction. The technicalities related to lattice calculations are discussed along with author's method of solving the scattering problem in a discrete box of size L . It is shown that the presented approach is capable of producing the fully non-perturbative results for the cold atomic gases and the dilute neutron matter.

Methodology of computing the spectral function, by performing the analytic continuation of the temperature Green's function from the imaginary time axis to the real time axis, is developed. It consists of the SVD method and the maximum entropy method which are discussed in the thesis. The reconstruction capabilities of the spectral function turned out to be sufficient to determine the spectral function and as a consequence, the superfluid properties of the studied systems.

Results of numerical simulations are presented for the cold atomic gases in the unitary regime and the dilute neutron matter at subnuclear density: 0.003 fm^{-3} . For the gas of cold atoms we found the evidence of the existence of the so called "pseudogap phase", where the system is already not superfluid, yet the Cooper pairs still exist. Obtained results lead to the conclusion that the gas of cold atoms in the unitary regime is not a BCS-type superfluid, and it should be considered a new type of superfluid with properties which might be similar to high-temperature superconductors.

For dilute neutron matter the total energy and the chemical potential as a function temperature is presented. The critical temperature for the superfluid-normal phase transition is

estimated and the parameters of quasiparticle spectrum (energy gap, effective mass, mean-field potential) are determined. Although the “pseudogap phase” is not explicitly determined in this case, obtained results indicate that the system is not a BCS-type superfluid at low temperatures. It shows the large value of $\Delta/T_c \approx 3.2$ obtained by numerical simulations, which is almost two times higher than value predicted by the BCS theory.

Spis treści

Wstęp	11
1 Fizyka silnie skorelowanych rozrzedzonych gazów fermionowych	13
1.1 Układ jednostek	13
1.2 Ogólne właściwości rozrzedzonych gazów fermionowych	13
1.2.1 Oddziaływanie niskoenergetycznych cząstek	13
1.2.2 Rozpraszanie cząstek przy niskich energiach	14
1.2.3 Właściwości układu a długość rozpraszania	15
1.3 Gazy atomowe	15
1.3.1 Przegląd ogólnych właściwości	16
1.3.2 Rezonans Feshbacha	22
1.3.3 Uniwersalność reżimu unitarnego	27
1.4 Rozrzedzona materia neutronowa	29
2 Metody teoretyczne	35
2.1 Metoda Kwantowego Monte Carlo dla temperatury zera bezwzględnego	35
2.1.1 Kwantowa wariacyjna metoda Monte Carlo	36
2.1.2 Dyfuzyjna metoda kwantowego Monte Carlo	37
2.2 Przegląd przybliżonych metod teoretycznych wykorzystanych do opisu reżimu unitarnego	41
2.2.1 Przybliżenie BCS	41
2.2.2 Metoda funkcjonału gęstości	42
2.2.3 Metoda dynamicznego pola średniego	44
2.2.4 Metoda rozwinięcia ϵ	46
2.3 Podsumowanie	48

3	Metoda Kwantowego Monte Carlo dla temperatur skończonych	51
3.1	Gaz oddziałujących fermionów w skończonych temperaturach	51
3.1.1	Ogólne sformułowanie	51
3.1.2	Wartość oczekiwana operatora jednociąłowego	56
3.1.3	Wartość oczekiwana operatora dwuciąłowego	58
3.1.4	Obliczanie temperaturowej funkcji Greena	59
3.2	Wybór bazy jednocząstkowej	60
3.3	Rozpraszanie na sieci	63
3.3.1	Oddziaływanie na sieci	64
3.3.2	Macierz przejścia T	65
3.3.3	Przykład: model Hubbarda	68
3.4	Transformacja Hubbarda-Stratonovicha	69
3.4.1	Transformacja HS dla modelu Hubbarda	70
3.4.2	Transformacja HS dla rozszerzonego modelu Hubbarda	72
3.5	Funkcja spektralna	73
3.5.1	Metoda SVD	75
3.5.2	Metoda maksymalnej entropii	83
3.6	Teoria skalowania dla układów skończonych	87
3.6.1	Parametr porządku	88
3.6.2	Temperatura krytyczna przejścia fazowego	90
4	Wyniki	93
4.1	Parametry symulacji numerycznych	93
4.1.1	Parametry sieci	93
4.1.2	Wybór stałych sprzężenia oddziaływania	95
4.1.3	Dokładność wyznaczania wartości oczekiwanych	96
4.2	Zimne gazy atomowe	98
4.2.1	Granica unitarna	100
4.2.2	Reżim unitarny	109
4.3	Materia neutronowa	113
	Podsumowanie	123
	A Stabilizacja algorytmu w niskich temperaturach	127
	Bibliografia	131

Wstęp

W ostatnich latach jesteśmy świadkami ogromnego postępu w pułapkowaniu i chłodzeniu rozrzedzonych gazów atomowych, czego dowodem są dwie nagrody Nobla przyznane w tej dziedzinie (1997 i 2001). Schłodzone, do temperatur rzędu ułamków nK , gazy atomów fermionowych stanowią niezwykle użyteczne laboratorium, w którym możemy badać właściwości silnie skorelowanych kwantowych układów wielu ciał. Właściwości rozrzedzonego gazu atomów fermionowych zmieniają się diametralnie w zależności od siły oddziaływania, która charakteryzowana jest przez jedną wielkością zwaną długością rozpraszania a . W przypadku słabego oddziaływania przyciągającego ($a < 0$) w układzie tworzą się pary Coopera, opisywane teorią nadprzewodnictwa BCS. Gdy oddziaływanie staje się na tyle silne aby pary fermionów utworzyły stan związany ($a > 0$), układ staje się układem bozonów, który w dostatecznie niskich temperaturach podlega kondensacji Bosego-Einsteina. Szczególnie interesujący jest przypadek, kiedy oddziaływanie pomiędzy atomami charakteryzowane jest przez dużą, w porównaniu ze średnią odległością pomiędzy atomami, wartość długości rozpraszania. Jest to tzw. reżim unitarny, w którym układ znajduje się w stanie pośrednim pomiędzy kondensatem Bosego-Einsteina, a nadprzewodnikiem BCS. Poznanie właściwości tego układu ma kluczowe znaczenie dla wielu dziedzin fizyki: fizyki jądra atomowego, fizyki gwiazd neutronowych, nadprzewodników wysokotemperaturowych i chromodynamiki kwantowej.

Wyznaczenie fizycznych właściwości układu fermionów w reżimie unitarnym było od wielu lat wyzwaniem dla kwantowej teorii układów wielu ciał. W ciągu ostatnich kilkunastu lat przedstawiono wiele teoretycznych wyników, różniących się pomiędzy sobą czasem nawet o rząd wielkości. Główny problem obliczeń teoretycznych wynika z tego, że układ, choć jest rozrzedzonym gazem, jest również silnie skorelowany i oddziaływanie nie może być potraktowane jako małe zaburzenie. Skutkuje to tym, że wszelkie metody perturbacyjne obarczone są błędem niemożliwym do oszacowania.

Pokrewnym przykładem układu złożonego z silnie oddziałujących fermionów jest rozrze-

dzona materia neutronowa. Przy gęstościach podjądrowych (mniejszych od 0.01 nukleona/ fm^3) oddziaływanie neutron-neutron można opisać dwoma parametrami: długością rozpraszania i zasięgiem efektywnym. Oddziaływanie to jest jednak silne i opis właściwości materii neutronowej, który jest niezwykle istotnym elementem badań jąder atomowych i gwiazd neutronowych, od ponad 40 lat stanowi wyzwanie dla teorii układów jądrowych.

Celem niniejszej rozprawy jest zbadanie właściwości silnie skorelowanego gazu fermionów, a w szczególności gazu atomów w reżimie unitarnym oraz rozrzedzonej materii neutronowej w sposób dokładny, tzn. wolny od różnych niekontrolowanych przybliżeń. Dynamiczny rozwój nowych metod numerycznych, opartych na metodzie Monte Carlo oraz dostępność wystarczających mocy obliczeniowych powodują, że badania takie są w chwili obecnej możliwe do przeprowadzenia.

Rozprawa doktorska składa się z czterech rozdziałów. Pierwszy rozdział ma charakter przeglądowny. Przedstawiona jest aktualna wiedza (pozyskana zarówno w trakcie badań teoretycznych jak i eksperymentalnych) dotycząca fizyki silnie oddziałujących gazów fermionowych. Rozdział drugi zawiera przegląd podejść teoretycznych, które zostały dotychczas wykorzystane do opisu silnie skorelowanego gazu fermionów. Szczególna uwaga zwrócona jest na istniejące metody obliczeń dokładnych, opartych na podejściu Monte Carlo, z uwagi na fakt, że będą one stanowiły podstawowe źródło danych, z którymi będą porównywane wyniki otrzymane w ramach tej rozprawy. Rozdział trzeci poświęcony jest dokładnemu omówieniu formalizmu wykorzystanej metodologii badań. Przedstawiona jest metoda kwantowego Monte Carlo zdefiniowana dla temperatur skończonych. Serce tej metody stanowi transformacja Hubbarda-Stratonovicha, której postać dokładnie jest opisana zarówno dla przypadku oddziaływania o zerowym zasięgu efektywnym jak również autorskie rozszerzenie na przypadek ze skończonym zasięgiem efektywnym. Dyskutowany jest formalizm obliczeń na sieci. W szczególności przedstawiona jest autorska metoda wyznaczania parametrów niskoenergetycznego rozpraszania w sytuacji, gdy problem zdefiniowany jest na sieci. Rozdział ten zawiera również opis metod: SVD oraz maksymalnej entropii, wykorzystanych do obliczenia funkcji spektralnej badanych układów, ze szczególnym zwróceniem uwagi na ograniczenia tych metod. W rozdziale czwartym zostały przedstawione wyniki obliczeń dla zimnych gazów atomowych jak również dla rozrzedzonej materii neutronowej o gęstości 0.003 fm^{-3} . Otrzymane wyniki zostały skonfrontowane z aktualną wiedzą odnośnie tych układów. Na końcu rozprawy przedstawione jest krótkie podsumowanie otrzymanych wyników, oraz ich wpływ na bieżącą wiedzę.

Rozdział 1

Fizyka silnie skorelowanych rozrzedzonych gazów fermionowych

1.1 Układ jednostek

W całej rozprawie stosowany jest *naturalny* układu jednostek, tzn.:

$$c = \hbar = k_B = 1, \quad (1.1)$$

gdzie: c - prędkość światła w próżni, \hbar - stała Plancka dzielona przez 2π , k_B - stała Boltzmanna.

1.2 Ogólne właściwości rozrzedzonych gazów fermionowych

1.2.1 Oddziaływanie niskoenergetycznych cząstek

W ciągu wielu lat tzw. *efektywne teorie* udowodniły swoją przydatność w fizyce niskich energii. Idea tych teorii polega na założeniu, że fizyka niskich energii nie zależy od fizyki wysokich energii, tzn. informacja o dynamice procesów zachodzących przy wysokich energiach jest nieistotna ze względu na opis dynamiki procesów przy niskich energiach¹. Oznacza to, że możemy oddzielić fizykę niskich energii od fizyki wysokich energii, redukując w ten sposób drastycznie liczbę stopni swobody wymaganą do wykonania precyzyjnych obliczeń [1].

¹Pojęcia wysokich i niskich energii rozumiane są inaczej niż jest to przyjmowane zwyczajowo w fizyce jądrowej. W rozprawie tej, przez niskie energie rozumiemy skalę energetyczną, przy której rozpraszanie cząstek można dobrze opisać za pomocą kilku pierwszych fal parcjalnych.

Idea teorii efektywnej pojawiła się w fizyce jądrowej na początku lat czterdziestych, kiedy H. Bethe wprowadził *teorię zasięgu efektywnego* do opisu niskoenergetycznego rozpraszania nukleonów. H. Bethe pokazał, że wyniki eksperymentów niskoenergetycznych nie zależą od szczegółów oddziaływania nukleon-nukleon, lecz jedynie od małej liczby efektywnych parametrów [2].

W roku 1993 grupa Stoks *et al.*, z Uniwersytetu w Nijmegen (Holandia) przeanalizowała wyniki z prawie 4000 różnych eksperymentów rozproszeniowych nukleon-nukleon, wykonanych przy niskich energiach (energia zderzenia w układzie laboratoryjnym nie przekraczająca 350 MeV), których wyniki zostały opublikowane w czasopiśmie w latach 1955-1992 [3]. W wyniku analizy stwierdzono, że wszystkie te dane można opisać poprawnie w ramach jednego spójnego zbioru przesunięć fazowych δ_l . Oznacza to, że każda teoria, która poprawnie odtwarza przesunięcia fazowe również poprawnie będzie odtwarzała wyniki eksperymentów. Jednakże, matematycznie problem znalezienia postaci oddziaływania nukleon-nukleon na podstawie znajomości przesunięć fazowych jest źle postawiony, tzn. istnieje wiele różnych oddziaływań nukleon-nukleon, które prowadzą do tych samych wartości przesunięć fazowych [4, 5, 6]. Oddziaływania te stanowią wspomniane wcześniej oddziaływania efektywne. Z tego względu całą fizykę niskich energii zamiast opisywać w terminach oddziaływania możemy opisywać w termiach przesunięć fazowych δ_l , nie odwołując się bezpośrednio do konkretnej postaci oddziaływania.

1.2.2 Rozpraszanie cząstek przy niskich energiach

Dla rozrzedzonych gazów fermionowych w niskich temperaturach, elementarny proces jakim jest rozpraszanie fermionów zachodzi przy energiach rzędu energii Fermiego, która jest wielkością małą. Zatem główny wkład do amplitudy rozpraszania pochodzi od fali s ($l = 0$). Wkłady do rozpraszania od komponentów o wyższych momentach pędu można zaniedbać, jeśli spełnione są relacje:

$$r_0 \ll \lambda_T, \quad r_0 p_F \lesssim 1, \quad (1.2)$$

gdzie r_0 - zasięg oddziaływania, p_F - pęd Fermiego, $\lambda_T = \sqrt{2\pi^2/mT}$ - termiczna długość fali de Broglie'a. Pęd Fermiego dla nieoddziałującego gazu fermionów wyznaczony jest za pomocą relacji $p_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$, gdzie $n = N/V$ jest gęstością. Relacje (1.2) będziemy uznawać za definicję *rozrzedzonego gazu Fermiego*. W dalszej części rozprawy będziemy zakładać milcząco, że są one spełnione. Ze względów praktycznych wygodne jest również wprowadzenie

energii Fermiego ε_F oraz energii stanu podstawowego nieoddziałującego gazu fermionów E_{fg} danych odpowiednio przez $\varepsilon_F = p_F^2/2m$ oraz $E_{fg} = \frac{3}{5}N\varepsilon_F$.

W przypadku rozpraszania cząstek w fali s , rozpraszanie jest sferycznie-symetryczne i amplituda rozpraszania może być zapisana jako [7]:

$$f(p) \stackrel{p \rightarrow 0}{\cong} \frac{1}{-1/a + \frac{1}{2}r_{\text{eff}}p^2 - ip}, \quad (1.3)$$

gdzie parametry a i r_{eff} nazywamy odpowiednio *długością rozpraszania* i *zasięgiem efektywnym*. Odwołując się do teorii oddziaływania efektywnego twierdzimy, że każde oddziaływanie, które poprawnie odtwarza wartości tych dwóch parametrów jest w stanie poprawnie opisać właściwości rozrzedzonego gazu Fermiego (patrz paragraf 1.2.1).

1.2.3 Właściwości układu a długość rozpraszania

Główną informację o charakterze i sile oddziaływania przechowuje parametr a - długość rozpraszania. Aby to pokazać, wykorzystamy asymptotyczną postać funkcji falowej, która dla $r > r_0$ wynosi [8]:

$$\psi(r) \cong 1 - \frac{a}{r}, \quad (1.4)$$

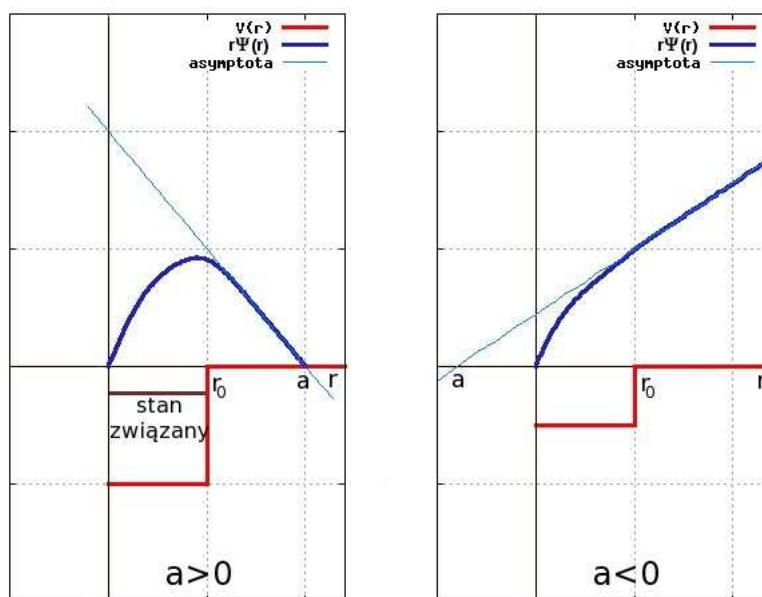
gdzie r jest względną odległością pomiędzy cząstkami. Schematyczny wygląd funkcji falowej $r\psi(r)$ w zależności od głębokości potencjału przyciągającego pokazany jest na rysunku 1.1. Dodatnia wartość długości rozpraszania odpowiada przypadkowi gdy istnieją stany związane układu. Energia wiązania wyraża się przez:

$$\epsilon_b = -\frac{1}{2Ma^2} \quad (1.5)$$

gdzie $M = m/2$ jest masą zredukowaną. Ujemna długość rozpraszania odpowiada potencjałowi dla którego nie istnieją stany związane. Wraz ze wzrostem głębokości potencjału długość rozpraszania staje się coraz bardziej ujemna. W momencie gdy głębokość potencjału przekracza pewną krytyczną wartość, pojawia się stan związany o energii wiązania równej zero. Ze wzoru (1.5) widać, że sytuacji tej odpowiada warunek $a = \pm\infty$.

1.3 Gazy atomowe

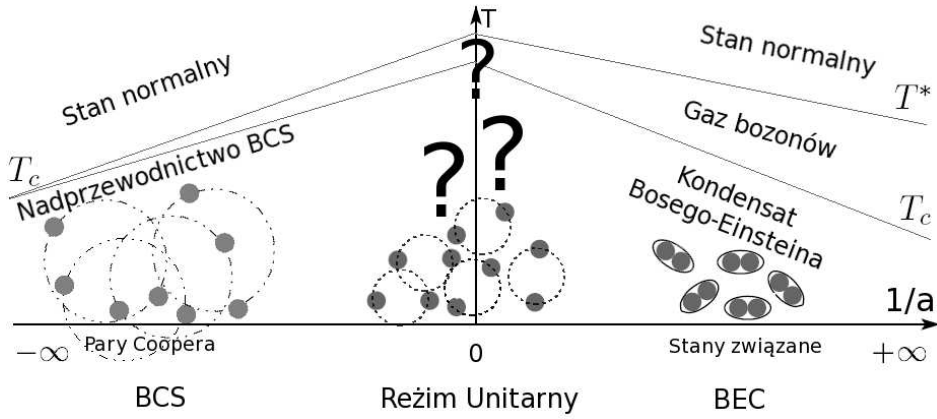
W ciągu ostatniej dekady obserwujemy ogromne zainteresowanie badaniami nad rozrzedzonymi gazami atomowymi. W istocie pierwsza eksperymentalna realizacja kondensatu Bosego-



Rysunek 1.1: Schematyczny wygląd funkcji falowej $r\psi(r)$ w zależności od głębokości potencjału przyciągającego. Zaznaczono również postać asymptotyczną $r\psi(r) \sim (r - a)$.

Einsteina (BEC) w roku 1995 [9, 10, 11] otworzyła nowy rozdział fizyki atomowej. Eksperymenty te skupiają się przede wszystkim na zbadaniu właściwości gazu atomów traktowanego jako układ wielociałowy (we wcześniejszych badaniach koncentrowano się głównie na zbadaniu właściwości pojedynczego atomu). Właściwości tego układu wyznaczone są przez statystykę jakiej podlegają atomy oraz zachodzące pomiędzy nimi oddziaływanie. Początkowo uwagę skupiano na gazach atomowych podlegających statystyce Bosego-Einsteina ale już po kilku latach uwagę eksperymentatorów i teoretyków przyciągnęły również badania nad fermionowymi gazami atomowymi, podlegającymi statystyce Fermiego-Diraca [12, 13, 14].

Kolejnym przełomem w badaniach nad gazami atomowymi było spostrzeżenie, że dzięki rezonansowi Feshbacha możliwe jest sterowanie siłą oddziaływania pomiędzy atomami za pomocą zewnętrznego pola magnetycznego. W roku 2003 grupa JILA pokazała eksperymentalnie, że fermionowe gazy atomowe, w przypadku gdy oddziaływanie pomiędzy atomami jest silne i przyciągające, tworzą molekuly (stany związane), które efektywnie można traktować jako gaz bozonów [15]. Dało to nowe możliwości jednoczesnego badania zarówno gazów fermionowych jak i bozonowych oraz przejścia pomiędzy tymi dwoma reżimami [16, 17, 18, 19, 20, 21, 22]. Z tego powodu dalsza część rozdziału będzie jedynie poświęcona gazowi atomów podlegających statystyce Fermiego-Diraca, który w skrócie będziemy nazywać gazem fermionów.



Rysunek 1.2: Ogólne właściwości rozrzedzonego gazu fermionów w zależności od siły oddziaływania pomiędzy cząstkami i temperatury układu. Siła oddziaływania charakteryzowana jest przez długość rozpraszania. Małym i ujemnym wartościami długości rozpraszania ($1/a \rightarrow -\infty$) odpowiada słabe oddziaływanie przyciągające, natomiast małym i dodatnim wartościami długości rozpraszania ($1/a \rightarrow +\infty$) odpowiada silne oddziaływanie przyciągające.

1.3.1 Przegląd ogólnych właściwości

Efektywne oddziaływanie atom-atom w fermionowych gazach atomowych ma charakter krótkozasięgowego oddziaływania przyciągającego. Przy typowych gęstościach realizowanych laboratoryjnie spełniona jest relacja [23]:

$$p_F r_{\text{eff}} \ll 1. \quad (1.6)$$

Implikuje to, że wkład do amplitudy rozpraszania (1.3) związany z zasięgiem efektywnym można pominąć. Oddziaływanie atom-atom całkowicie wyznaczone jest przez jeden parametr - długość rozpraszania.

Rysunek 1.2 przedstawia ogólne właściwości gazu fermionów w funkcji odwrotności długości rozpraszania. W przypadku słabego oddziaływania przyciągającego ($1/a \rightarrow -\infty$) problem wielociałowy można rozwiązać zarówno dla temperatury zera bezwzględnego jak i dla temperatur skończonych wykorzystując teorię BCS, po raz pierwszy wprowadzoną do opisu zjawiska nadprzewodnictwa [24]. Teoria BCS pokazuje, że poniżej pewnej temperatury krytycznej $T_c \ll \varepsilon_F$ powierzchnia Fermiego staje się niestabilna ze względu na tworzenie się par Coopera. Pojawienie się par Coopera jest równoważne z pojawieniem się nadprzewodnictwa (nadciekłości w przypadku cząstek nie posiadających ładunku). Dla temperatury $T = 0$ energię na cząstkę można zapisać w postaci szeregu zawierającego kolejne potęgi małego parametru

$|p_F a| \ll 1$ [23]²:

$$\frac{E}{N} = \frac{E_{fg}}{N} \left(1 + \frac{10}{9\pi} p_F a + \frac{4(11 - 2 \log 2)}{21\pi^2} (p_F a)^2 + \dots \right) - \frac{3\Delta^2}{8\varepsilon_F}, \quad (1.7)$$

gdzie Δ odpowiada eksponencjalnie małej energii związanej z zyskiem energii wskutek utworzenia stanu nadprzewodzącego (człon nieperturbacyjny):

$$\Delta = \left(\frac{2}{e} \right)^{7/3} \varepsilon_F e^{\pi/2 p_F a} \approx 1.76 T_c. \quad (1.8)$$

W przypadku silnego oddziaływania przyciągającego ($1/a \rightarrow +\infty$) atomy fermionowe tworzą stany związane (dimery). Rozmiar związanej pary jest rzędu długości rozpraszania. Ponieważ wypadkowy spin pary fermionów jest całkowity, układ ten efektywnie można traktować jako gaz bozonów. Efektywne oddziaływanie pomiędzy dimerami ma charakter słabego oddziaływania odpychającego, które charakteryzowane jest przez długość rozpraszania [25, 26]:

$$a_{dd} = 0.6a. \quad (1.9)$$

Z tego powodu problem można rozwiązać wykorzystując perturbacyjną teorię kondensacji Bosego-Einsteina (BEC) [27]³. Dla temperatury $T = 0$ funkcja energii na cząstkę, rozwinięta w szereg względem małego parametru $p_F a_{dd} \ll 1$ i wyrażona w jednostkach energii Fermiego ε_F wynosi [23]:

$$\frac{E}{N} = \frac{\epsilon_b}{2} + \frac{p_F a_{dd}}{6\pi} \left[1 + \frac{128}{15\sqrt{6\pi^3}} (p_F a_{dd})^{3/2} + \dots \right] \varepsilon_F, \quad (1.10)$$

gdzie $\epsilon_b \approx -1/ma^2$ jest energią wiązania pary fermionów.

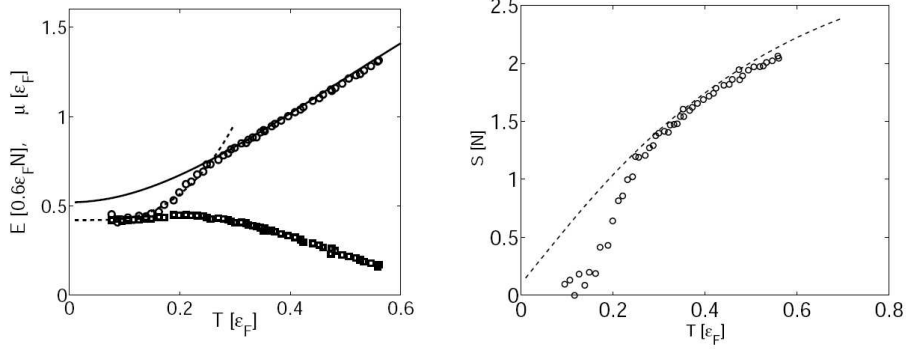
Z układem BEC związane są dwie charakterystyczne temperatury: temperatura T^* poniżej której tworzą się stany związane (dimery) oraz temperatura kondensacji T_c poniżej której tworzy się kondensat Bosego-Einsteina [28]. Jako dobre oszacowanie temperatury kondensacji T_c można wykorzystać przypadek nieoddziałującego gazu bozonów [29]:

$$T_c = \frac{2\pi}{m} \left(\frac{n_d}{\zeta(3/2)} \right)^{2/3} \approx 0.218 \varepsilon_F, \quad (1.11)$$

gdzie n_d jest gęstością dimerów, $\zeta(3/2) \approx 2.612$.

²Wyrażenie w nawiasie jest jedynie wynikiem rozwinięcia perturbacyjnego względem małego parametru $|p_F a|$. Człon poza nawiasem („pairing”) nie może zostać otrzymany w ramach rachunku perturbacyjnego, poprzez wykonanie rozwinięcia wokół nieoddziałującego gazu Fermiego, z uwagi na brak przejścia fazowego w gazie nieoddziałujących fermionów.

³W przeciwieństwie do gazów fermionowych, dla układów bozonowych możliwe jest wykonanie poprawnego rozwinięcia perturbacyjnego traktując oddziaływanie jako zaburzenie, z uwagi na istnienie przejścia fazowego w nieoddziałującym gazie bozonów. Jako punkt startu dla wspomnianej perturbacyjnej teorii kondensacji wybiera się stan kondensatu Bosego-Einsteina dla przypadku nieoddziałujących bozonów.



Rysunek 1.3: Wyniki obliczeń Monte Carlo dla granicy unitarnej. Z lewej strony energia całkowita $E(T)/E_{fg}$ (kółka) i potencjał chemiczny $\mu(T)/\epsilon_F$ (kwadraty) w funkcji temperatury. Linia ciągła przedstawia przesuniętą energię nieoddziałującego gazu Fermiego w taki sposób aby poprawnie odtwarzać równanie stanu dla wysokich temperatur. Linia przerywana przedstawia krzywą $E_{ph+qp}(T)$ (równanie 1.12). Z prawej strony entropia na cząstkę (kółka). Linia przerywana przedstawia entropię dla nieoddziałującego gazu Fermiego, odpowiednio przesuniętą. Rysunek z publikacji [39].

Pomiędzy obszarem BCS a BEC istnieje obszar pośredni, zwany *reżimem unitarnym*. W takim przypadku długość rozpraszania staje się znacznie większa niż średnia odległość pomiędzy cząstkami, która z kolei jest zdecydowanie większa niż zasięg oddziaływania. Fizycznie oznacza to, że gaz fermionów jest jednocześnie rozrzedzony i silnie oddziałujący. Nie istnieje wówczas żaden mały parametr, który można by wykorzystać do konstrukcji rachunku perturbacyjnego. Wymagane jest wykonanie pełnego rachunku nieperturbacyjnego. Z tego powodu, gaz atomów znajdujący się w reżimie unitarnym stanowi idealne pole dla testowania nieperturbacyjnych metod rozwiązywania problemów wielociałowych [30, 31, 32, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 39].

Szczególny przypadek reżimu unitarnego, który charakteryzowany jest przez nieskończoną wartość długości rozpraszania ($p_F a \rightarrow \pm\infty$), będziemy nazywali *granicy unitarną*. Przypadek ten jest szczególnie ważny z uwagi na jego uniwersalność, co czyni go interesującym dla wielu innych dziedzin fizyki: fizyki materii neutronowej, plazmy kwarkowo-gluonowej, teorii strun, a także dla nadprzewodnictwa wysokotemperaturowego (patrz podrozdział 1.3.3).

Rysunek 1.3 przedstawia energię całkowitą oraz entropię w funkcji temperatury dla granicy unitarnej. Wyniki otrzymano za pomocą metody kwantowego Monte Carlo. Autorzy odkryli, że dla tego układu istnieje charakterystyczna temperatura $T_0 = 0.23(2) \epsilon_F$ powyżej której

energia całkowita układu jest bardzo dobrze opisywana przez energię nieoddziałującego gazu Fermiego, przesuniętą w dół o stałą wartość 0.45. Poniżej T_0 zauważono, że zależność temperatury energii można dobrze odtworzyć zakładając istnienie dwóch rodzajów wzbudzeń elementarnych: typu bozonowego (fononów Bogoliubowa-Andersona) i typu fermionowego (kwazicząstek Bogoliubowa):

$$E_{ph+qp}(T) = \frac{3}{5} \varepsilon_F N \left[\xi_s + \frac{\sqrt{3}\pi^4}{16\xi_s^{3/2}} \left(\frac{T}{\varepsilon_F}\right)^4 + \frac{5}{2} \sqrt{\frac{2\pi\Delta^3 T}{\varepsilon_F^4}} \exp\left(-\frac{\Delta}{T}\right) \right], \quad (1.12)$$

gdzie:

$$\Delta \approx \left(\frac{2}{e}\right)^{7/3} \varepsilon_F \exp\left(\frac{\pi}{2p_{Fa}}\right), \quad \xi_s = 0.4. \quad (1.13)$$

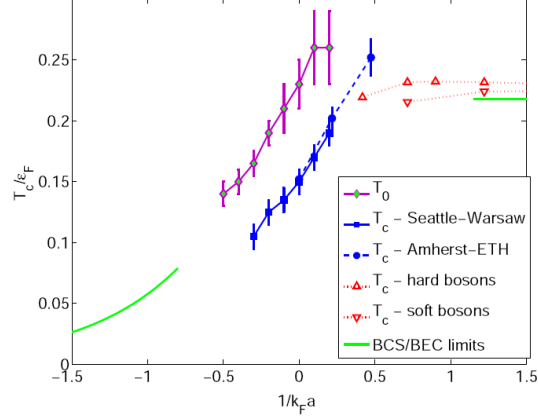
Bardzo ciekawe zachowanie wykazuje również potencjał chemiczny w funkcji temperatury. Autorzy odkryli, że dla temperatur poniżej T_0 jest on prawie stały. Zależność taka bardzo przypomina zachowanie potencjału chemicznego dla nieoddziałującego gazu bozonów poniżej temperatury kondensacji.

Znaczenie fizyczne temperatury charakterystycznej T_0 nie jest jasne. Wyniki dotychczasowych symulacji wskazują, że nie jest to temperatura przejścia fazowego pomiędzy stanem nadciekłym a normalnym. Wyniki symulacji Monte Carlo wskazują, że dla granicy unitarnej temperatura przejścia fazowego leży poniżej T_0 i wynosi $T_c \simeq 0.15 \varepsilon_F$ [35, 39]. Należy zauważyć, że jest to temperatura bardzo wysoka (mierzona względem energii Fermiego) w porównaniu z innymi układami fizycznymi, w których zachodzi podobne przejście fazowe. Porównanie temperatur przejścia fazowego dla różnych układów fizycznych zawiera tabela 1.1.

Rysunek 1.4 przedstawia wyniki obliczeń temperatury przejścia fazowego pomiędzy stanem nadciekłym i normalnym w funkcji długości rozpraszania otrzymanych za pomocą różnych metod teoretycznych.

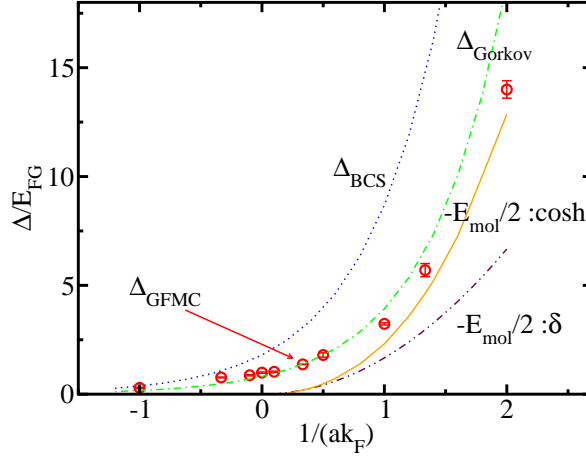
	T_c/ε_F
Konwencjonalne nadprzewodniki	$10^{-5} - 10^{-4}$
Nadciekły ^3He	$\sim 10^{-3}$
Nadprzewodniki wysokotemperaturowe	$\sim 10^{-2}$
Gazy fermionowe w reżimie unitarnym	~ 0.2

Tabela 1.1: Porównanie temperatury przejścia fazowego odniesionej do energii Fermiego dla różnych typów nadprzewodników.



Rysunek 1.4: Temperatura przejścia fazowego pomiędzy stanem nadciekłym i normalnym w funkcji długości rozpraszania. Zielona linia w lewym dolnym rogu jest przewidywaniem teorii BCS z poprawką Gorkova-Melika-Barkhudarowa [40]. Zielona linia w prawym górnym rogu jest temperaturą kondensacji dla nieoddziałującego gazu bozonów, $T_c = 0.218 \epsilon_F$. Czerwone trójkąty reprezentują T_c otrzymaną z modelu twardych i miękkich kul [41]. Niebieskie kwadraty i koła reprezentują T_c z publikacji [39] i [42] odpowiednio. T_0 jest temperaturą dla której zachowanie systemu wykazuje przejście pomiędzy zachowaniem typowym dla układów bozonowych i fermionowych. Rysunek z publikacji [39].

Dla gazu atomów będącego w reżimie unitarnym szczelina energetyczna, charakteryzująca stan nadciekły, jest jak dotychczas wielkością najmniej poznaną, zarówno od strony teoretycznej jak i doświadczalnej. W chwili obecnej techniki eksperymentalne wykorzystywane w badaniach zimnych gazów atomowych nie są na tyle rozwinięte aby można było zmierzyć tę wielkość „bezpośrednio”. Dostępne dane eksperymentalne w połączeniu z dodatkowym modelem teoretycznym prowadzą do wniosku, że wartość szczeliny energetycznej dla granicy unitarnej oraz dla temperatury zera bezwzględnej wynosi $\Delta_0 \approx 0.50 \epsilon_F$ [43, 44]. Wynik ten jest zgodny z wynikami istniejących symulacji numerycznych typu Monte Carlo [30, 31, 39, 45, 46]. Warto dodać, że gaz w reżimie unitarnym jest układem o największej szczelinie energetycznej, mierzonej względem energii Fermiego, z dotychczas poznanych układów fizycznych. Kolejnym zaskakującym wynikiem jest duża wartość stosunku $\Delta_0/T_c \approx 3.3$. Wartość ta jest około dwukrotnie większa niż przewidywanie teorii BCS, porównaj z równaniem (1.8), co oznacza, że teoria BCS nie jest w stanie, w sposób całkowicie poprawny, opisać stanu nadciekłego dla układu w reżimie unitarnym. Zależność temperaturowa szczeliny energetycznej $\Delta(T)$ dla gazu w reżimie unitarnym jest jak dotychczas nieznana (z wyjątkiem przewidywania teorii BCS).



Rysunek 1.5: Porównanie wartości szczeliny energetycznej dla temperatury zera bezwzględne- go w funkcji długości rozpraszania, otrzymanej różnymi metodami teoretycznymi. Szczelina energetyczna jest wyrażona w jednostkach $E_{FG} = 3/5 \varepsilon_F$. Δ_{GFM} przedstawia wyniki symulacji numerycznych Monte Carlo, $\Delta_{BCS} = \frac{8}{e^2} \varepsilon_F e^{\pi/2k_F a}$, $\Delta_{Gorkov} = \left(\frac{2}{e}\right)^{7/3} \varepsilon_F e^{\pi/2k_F a}$. E_{mol} oznacza energię stanu związanego pary fermionów, dla dwóch wykorzystanych przez autorów oddziaływań efektywnych. Rysunek z publikacji [31].

Rysunek 1.5 przedstawia porównanie wartości szczeliny energetycznej dla temperatury zera bezwzględne- go w funkcji długości rozpraszania, otrzymanej różnymi metodami teoretycznymi.

1.3.2 Rezonans Feshbacha

Największe osiągnięcia eksperymentów z udziałem gazów atomowych bezpośrednio związane są z możliwością sterowania w doświadczeniu długością rozpraszania za pomocą zewnętrznego pola magnetycznego \mathbf{B} . Jest to możliwe za pomocą tzw. rezonansu Feshbacha [47]. Rezonans w ogólności odnosi się do sytuacji, gdy następuje zależne od energii wzmocnienie przekroju czynnego na rozpraszanie cząstek wskutek istnienia metastabilnego stanu związanego tych cząstek.

Rezonans Feshbacha po raz pierwszy został wprowadzony w fizyce jądrowej aby opisać wąski rezonans występujący w całkowitym przekroju czynnym dla rozpraszania neutronów na jądrze atomowym. Rezonans jest wynikiem tworzenia się długożyciowego stanu związanego neutron-jądro o energii wiązania bliskiej energii padającego neutronu. Cechą charakterystyczną rezonansu Feshbacha jest fakt, że stan związany układu tworzy się w innym kanale oddziaływania niż kanał poprzez który oddziałuje początkowo padający neutron. Kanały te

odpowiednio zwane są kanałem zamkniętym i otwartym.

Aby dokładniej opisać zjawisko rezonansu Feshbacha wykorzystamy tzw. metodę kanałów sprzężonych [48, 49]. W tym celu rozważmy rozpraszanie dwóch atomów z wewnętrznymi stopniami swobody, które opisane są za pomocą „wewnętrznego” hamiltonianu \hat{H}_i^{wew} o stanach własnych $|\alpha\rangle$, tj.:

$$\hat{H}^{\text{wew}}|\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha|\alpha\rangle. \quad (1.14)$$

Zakładamy, że efektywny hamiltonian układu atom-atom, w układzie środka masy, można zapisać jako:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + \sum_{i=1}^2 \hat{H}_i^{\text{wew}} + \hat{V} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad (1.15)$$

gdzie μ jest masą zredukowaną, \hat{V} opisuje efektywne oddziaływanie pomiędzy atomami o skończonym zasięgu, które zależy od wewnętrznych stopni swobody. Stany własne części hamiltonianu \hat{H}_0 nazywamy kanałami:

$$\hat{H}_0|\mathbf{p}_{\alpha\beta}\alpha\beta\rangle = E_{\alpha\beta}|\mathbf{p}_{\alpha\beta}\alpha\beta\rangle, \quad (1.16)$$

gdzie $E_{\alpha\beta} = \mathbf{p}_{\alpha\beta}^2/2\mu + \varepsilon_\alpha + \varepsilon_\beta$, $\mathbf{p}_{\alpha\beta}$ jest względnym pędem. Kanały $|\mathbf{p}_{\alpha\beta}\alpha\beta\rangle$ rozpinają przestrzeń Hilberta naszego problemu. Kanał będziemy nazywali otwartym jeśli dla ustalonej energii zderzenia E wartość $p_{\alpha\beta} = \sqrt{2\mu(E - \varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta)}$ jest wielkością rzeczywistą. W przeciwnym wypadku kanał będziemy nazywali kanałem zamkniętym, co fizycznie oznacza możliwość utworzenia się stanu związanego. Niech \mathcal{Q} będzie podprzestrzenią składającą się z kanałów zamkniętych, natomiast \mathcal{P} podprzestrzenią składającą się z kanałów otwartych. Rezonans Feshbacha pojawia się jako wynik przejścia układu z podprzestrzeni \mathcal{P} do podprzestrzeni \mathcal{Q} i następnie ponownie do podprzestrzeni \mathcal{P} . Przejście to jest możliwe dzięki oddziaływaniu \hat{V} , które sprzęga ze sobą kanały otwarte i zamknięte. Wprowadzając operatory rzutowe P i Q na podprzestrzenie odpowiednio \mathcal{P} i \mathcal{Q} , równanie Schrödingera $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ dla układu atom-atom można rozdzielić na dwa sprzężone równania:

$$(E - \hat{H}_{PP})|\psi_P\rangle = \hat{H}_{PQ}|\psi_Q\rangle, \quad (1.17)$$

$$(E - \hat{H}_{QQ})|\psi_Q\rangle = \hat{H}_{QP}|\psi_P\rangle, \quad (1.18)$$

gdzie: $|\psi_X\rangle = X|\psi\rangle$, $\hat{H}_{XY} = X\hat{H}Y$. Formalne rozwiązanie równania (1.18) ma postać:

$$|\psi_Q\rangle = \frac{1}{E^+ - \hat{H}_{QQ}}\hat{H}_{QP}|\psi_P\rangle, \quad (1.19)$$

gdzie $E^+ = E + i0$. Podstawiając je do równania (1.17) otrzymujemy:

$$(E - \hat{H}_{\text{eff}})|\psi_P\rangle = 0, \quad (1.20)$$

gdzie $\hat{H}_{\text{eff}} = \hat{H}_{PP} + \hat{H}_{PQ} \frac{1}{E^+ - \hat{H}_{QQ}} \hat{H}_{QP}$. Drugi człon w efektywnym hamiltonianie \hat{H}_{eff} można interpretować jako tymczasowe przejście układu z podprzestrzeni \mathcal{P} do podprzestrzeni \mathcal{Q} , propagację w podprzestrzeni \mathcal{Q} i następnie powrót do pierwotnej podprzestrzeni \mathcal{P} . Ponieważ, operator \hat{H}_{QQ} posiada zarówno dyskretne ϵ_m jak również ciągłe spektrum energii ϵ' , operator Greena przyjmuje postać:

$$\frac{1}{E^+ - \hat{H}_{QQ}} = \sum_m \frac{|\phi_m\rangle\langle\phi_m|}{E - \epsilon_m} + \int d\epsilon' \frac{|\phi(\epsilon')\rangle\langle\phi(\epsilon')|}{E^+ - \epsilon'}. \quad (1.21)$$

Jednakże, jeśli energia całkowita E jest bliska energii stanu związanego ϵ_0 , możemy pominąć inne wkłady do operatora Greena niż wkład $m = 0$. Ostatecznie równanie (1.20) przyjmuje postać:

$$(E - \hat{H}_{PP})|\psi_P\rangle = \frac{\hat{H}_{PQ}|\phi_0\rangle\langle\phi_0|\hat{H}_{QP}|\psi_P\rangle}{E - \epsilon_0}. \quad (1.22)$$

Formalne rozwiązanie powyższego równania można zapisać jako:

$$|\psi_P\rangle = |\psi_i^+\rangle + \frac{1}{E^+ - \hat{H}_{PP}} \frac{\hat{H}_{PQ}|\phi_0\rangle\langle\phi_0|\hat{H}_{QP}|\psi_P\rangle}{E - \epsilon_0}, \quad (1.23)$$

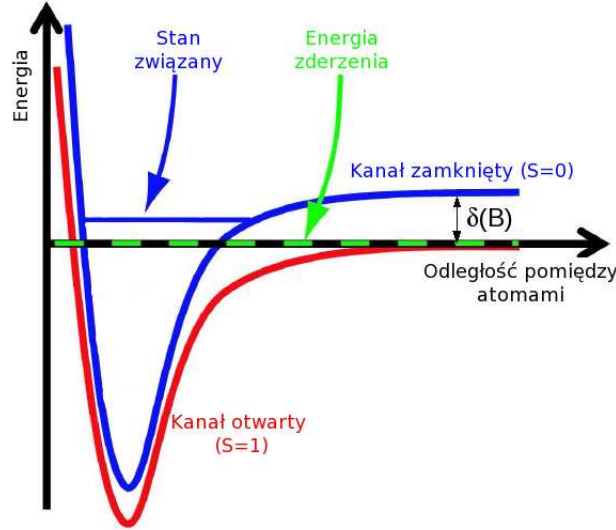
gdzie $|\psi_i^+\rangle$ jest stanem własnym \hat{H}_{PP} , reprezentującym falę padającą w kanale i (stan początkowy). Równanie (1.23) można rozwiązać mnożąc je lewostronnie przez $\langle\phi_0|\hat{H}_{QP}$. Rozwiązanie ma postać:

$$|\psi_P\rangle = |\psi_i^+\rangle + \frac{1}{E^+ - \hat{H}_{PP}} \frac{\langle\phi_0|\hat{H}_{QP}|\psi_i^+\rangle}{E - \epsilon_0 - \langle\phi_0|\hat{H}_{QP} \frac{1}{E^+ - \hat{H}_{PP}} \hat{H}_{PQ}|\phi_0\rangle} \hat{H}_{PQ}|\phi_0\rangle. \quad (1.24)$$

Zatem, element macierzy S_{ji} macierzy rozpraszania, określający amplitudę dla przejścia układu z kanału i do kanału j (i, j są kanałami otwartymi) wynosi:

$$S_{ji} = S_{ji}^0 + 2\pi i \frac{\langle\psi_j^-|\hat{H}_{PQ}|\phi_0\rangle\langle\phi_0|\hat{H}_{QP}|\psi_i^+\rangle}{E - \epsilon_0 - \langle\phi_0|\hat{H}_{QP} \frac{1}{E^+ - \hat{H}_{PP}} \hat{H}_{PQ}|\phi_0\rangle}, \quad (1.25)$$

gdzie $|\psi_j^-\rangle$ jest stanem własnym \hat{H}_{PP} , reprezentującym falę rozproszoną do kanału j (stan końcowy). Wyraźne staje się, że element macierzy S_{ji} składa się z dwóch części: człon bezpośredni S_{ji}^0 opisujący rozpraszanie w przypadku braku sprzężenia z kanałami zamkniętymi oraz dodatkowy wkład związany ze sprzężeniem się kanałów otwartych z kanałami zamkniętymi.



Rysunek 1.6: Schematyczna reprezentacja rezonansu Feshbacha dla atomów ${}^6\text{Li}$. Efektywne oddziaływanie pomiędzy rozpraszonymi atomami w stanie trypletowym jest silnie modyfikowane w przypadku gdy energia stanu związanego w stanie singletowym jest bliska energii zderzenia.

Szczególnie użyteczny wynik otrzymujemy, jeśli podprzestrzeń \mathcal{P} składa się tylko z jednego kanału otwartego. Wtedy element macierzowy S_{ii} można zapisać jako [49]:

$$S_{ii} = S_{ii}^0 \left(1 - \frac{i\Gamma}{E - \epsilon_0 - \Delta + \frac{i}{2}\Gamma} \right), \quad (1.26)$$

gdzie stałe Γ i Δ reprezentują odpowiednio szerokość i „przesunięcie” rezonansu. W przypadku, gdy mamy do czynienia z niskoenergetycznym rozpraszaniem, które charakteryzowane jest jedynie przez długość rozpraszania, elementy macierzowe S można zapisać jako: $S_{ii} = e^{-2ik_i a}$ oraz $S_{ii}^0 = e^{-2ik_i a_0}$, gdzie a_0 jest długością rozpraszania w przypadku braku sprzężenia kanału otwartego z zamkniętym. Zatem, jeśli potrafimy zmieniać względne położenie energii stanu związanego ϵ_0 względem energii zderzenia E to tym samym potrafimy kontrolować wartość długości rozpraszania, tj. $a = a(a_0, E - \epsilon_0)$.

Idee rezonansu Feshbacha można zastosować w przypadku gazów atomowych do kontroli siły oddziaływania pomiędzy atomami. W celu skupienia uwagi rozważmy przypadek atomów ${}^6\text{Li}$. Hamiltonian układu dwóch atomów umieszczonych w polu magnetycznym B , skierowanym wzdłuż osi z przyjmuje postać [49, 50]:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + \sum_{i=1}^2 (\hat{V}_i^{\text{hf}} + \hat{V}_i^{\text{Z}}) + \hat{V}^{\text{C}} + \hat{V}^{\text{d}}, \quad (1.27)$$

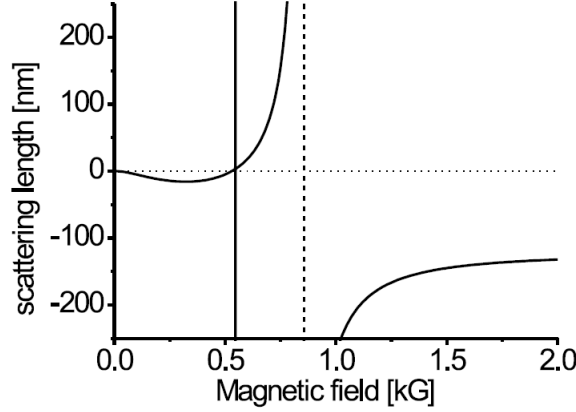
gdzie $\hat{V}^{\text{hf}} = a_{\text{hf}} \hat{\mathbf{S}}^e \cdot \hat{\mathbf{S}}^n$ jest członem związanym ze strukturą nadsubtelną atomów, $\hat{V}^Z = (\gamma^e \hat{S}_z^e - \gamma^n \hat{S}_z^n) B$ jest członem Zeemana. a_{hf} , γ^e i γ^n są stałymi sprzężenia, $\hat{\mathbf{S}}$ jest operatorem spinu. Indeksy e i n odnoszą się odpowiednio do spinu elektronów i spinu jądra atomowego. Człon \hat{V}^C opisuje efektywne oddziaływanie kulombowskie pomiędzy wszystkimi ładunkami atomów (elektronów i protonów). Ostatni wkład \hat{V}^d jest oddziaływaniem magnetycznym dipolowym. Stany wewnętrzne atomu charakteryzowane są przez dwie liczby kwantowe $|F, m_F\rangle$, gdzie pierwsza liczba kwantowa odpowiada całkowitemu spinowi atomu, druga rzutowi spinu na oś z . Załóżmy, że możemy produkować atomy w dwóch stanach różniących się spinem np. $|1\rangle \equiv |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$ i $|2\rangle \equiv |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$. Z uwagi na istnienie wkładu \hat{V}^C oddziaływanie atom-atom zależy od całkowitego momentu pędu pary atomów. Schematycznie energię oddziaływania dwóch atomów, w zależności od stanów w jakich się one znajdują, przedstawia rysunek 1.6. Linia $S = 1$ opisuje oddziaływanie w stanie trypletowym (kanał otwarty), w którym atomy znajdują się początkowo. Linia $S = 0$ opisuje oddziaływanie w stanie singletowym (kanał zamknięty), dla którego istnieje stan związany o energii bliskiej energii zderzenia. Ponieważ moment magnetyczny pary atomów różni się w zależności od kanału oddziaływania możliwa jest zmiana położenia względnego tych dwóch krzywych za pomocą zewnętrznego pola magnetycznego (poprzez człon \hat{V}^Z) a co za tym idzie zmiana względnego położenia stanu związanego względem energii zderzenia, tj. wielkość $E - \epsilon_0$ w wyrażeniu (1.26). Na rysunku 1.6 zostało oznaczone to przez $\delta(B)$. Dla pewnej wartości pola magnetycznego B_0 energia stanu związanego pokrywa się z energią zderzenia atomów. W przypadku braku sprzężenia pomiędzy kanałami obecność stanu związanego nie ma wpływu na rozpraszanie w kanale otwartym. Jednak w przypadku istnienia sprzężenia pomiędzy kanałami, które jest związane z częścią $(\hat{\mathbf{S}}_1^e - \hat{\mathbf{S}}_2^e) \cdot (\hat{\mathbf{S}}_1^n - \hat{\mathbf{S}}_2^n)$ członu $\hat{V}_1^{\text{hf}} + \hat{V}_2^{\text{hf}}$, podczas rozpraszania atomów może utworzyć się tymczasowy stan związany. Jego utworzenie się będzie istotnie modyfikowało przekrój czynny charakteryzowany przez długość rozpraszania, zobacz wzór (1.26).

Fenomenologicznie rezonans Feshbacha można opisać za pomocą efektywnego oddziaływania pomiędzy atomami w kanale otwartym dla którego długość rozpraszania dana jest przez:

$$a(B) = a_0 \left(1 - \frac{\Delta B}{B - B_0} \right), \quad (1.28)$$

gdzie a_0 jest długością rozpraszania w kanale otwartym w przypadku braku sprzężenia z kanałem zamkniętym, ΔB i B_0 opisują odpowiednio szerokość i pozycję rezonansu.

Rysunek 1.7 przedstawia zależność długości rozpraszania od pola magnetycznego dla ato-



Rysunek 1.7: Zależność długości rozpraszania od pola magnetycznego dla atomów ${}^6\text{Li}$. Szeroki rezonans występuje przy wartości pola magnetycznego $B_0 \approx 834 \text{ G}$ a jego szerokość wynosi $\Delta B \approx 300 \text{ G}$. Zaznaczony został również wąski rezonans dla pola magnetycznego $B_0 \approx 543 \text{ G}$. Rysunek z publikacji [16].

mów ${}^6\text{Li}$. Rezonans (zwany szerokim rezonansem) występuje przy wartości pola magnetycznego $B_0 \approx 834 \text{ G}$ a jego szerokość wynosi $\Delta B \approx 300 \text{ G}$ [16]. Rezonans ten wykorzystany został przy eksperymentach przeprowadzonych przez grupy: O'Hara *et al.*, (Uniwersytet Duke'a, 2002) [17], Bourdel *et al.*, (laboratorium Kastler-Brossel, Paryż, 2003) [16], Jochim *et al.*, (Uniwersytet Innsbruck, 2003) [18], Zwierlein *et al.*, (MIT, 2003) [19], Partridge *et al.*, (Uniwersytet Rice'a, 2005) [20]. Eksperymenty również przeprowadza się wykorzystując rezonans Feshbacha w atomach ${}^{40}\text{K}$. Eksperymenty z takimi atomami wykonała grupa Loftus *et al.*, (Uniwersytet Kolorado w Boulder, JILA, 2002) [21].

1.3.3 Uniwersalność reżimu unitarnego

Szczególny przypadek reżimu unitarnego, który spełnia warunki:

$$p_{\text{F}}a \rightarrow \pm\infty, \quad p_{\text{F}}r_{\text{eff}} \rightarrow 0, \quad (1.29)$$

nazywamy *granica unitarną*⁴.

W tej granicy amplituda rozpraszania (1.3) przyjmuje postać:

$$f(p) \stackrel{p \rightarrow 0}{=} \frac{i}{p}, \quad (1.30)$$

⁴Geneza nazwy związana jest z faktem, że w tej granicy całkowity przekrój czynny na rozpraszanie osiąga wartość maksymalną, jaka jest dopuszczalna przez warunek unitarności macierzy rozpraszania.

		$\xi(T = 0)$
Eksperyment ${}^6\text{Li}$	Bartenstein <i>et al.</i> , (Innsbruck) [53]	$0.27^{+0.12}_{-0.09}$
	Kinast <i>et al.</i> , (Duke) [54]	0.51(4)
	Partridge <i>et al.</i> , (Rice) [55]	0.46(5)
	Tarruell <i>et al.</i> , (Paryż) [56]	0.41(15)
Eksperyment ${}^{40}\text{K}$	Stewart <i>et al.</i> , (JILA) [57]	$0.46^{+0.05}_{-0.12}$
Teoria (QMC)	Astrakharchik <i>et al.</i> , [32]	0.42(1)
	Bulgac <i>et al.</i> , [34]	0.44
	Burovski <i>et al.</i> , [35]	0.493(14)
	Carlson <i>et al.</i> , [45]	0.42(1)

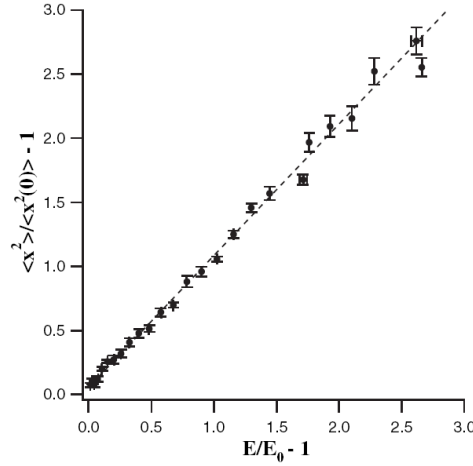
Tabela 1.2: Porównanie eksperymentalnych i teoretycznych wartości uniwersalnej funkcji ξ dla temperatury zera bezwzględne. Dla obliczeń teoretycznych podano tylko wyniki otrzymane metodą Monte Carlo.

natomiast całkowity przekrój czynny osiąga wartość maksymalną $\sigma = 4\pi/p^2$. Ponieważ amplituda rozpraszania (1.30) staje się niezależna od szczegółów oddziaływania mówimy, że przyjmuje postać *uniwersalną*. Jediną istotną skalą jaka pozostaje w problemie jest pęd Fermiego p_F . Z tego powodu wszystkie wielkości termodynamiczne powinny dać się zapisać jako iloczyn pewnej bezwymiarowej uniwersalnej funkcji zależnej tylko od stosunku T/ε_F oraz zależności opisującej nieoddziałujący gaz Fermiego [30, 51, 52], np. dla energii całkowitej mamy:

$$E(T) = \xi(T/\varepsilon_F)E_{fg}, \quad (1.31)$$

gdzie $E_{fg} = \frac{3}{5}N\varepsilon_F$ jest energią nieoddziałującego gazu Fermiego. Dokładne wyznaczenie funkcji $\xi(T/\varepsilon_F)$ zarówno teoretycznie jak i doświadczalnie stanowi cały czas wyzwanie. Porównanie aktualnie dostępnych wyników teoretycznych i doświadczalnych dla $T = 0$ przedstawia tabela 1.2.

Jedną z konsekwencji uniwersalności jest fakt, że dla układu znajdującego się w granicy unitarnej obowiązują takie same relacje termodynamiczne jak dla układu nieoddziałujących fermionów, np. korzystając z zależności $P = -\partial E/\partial V$ oraz równania (1.31) otrzymujemy, że dla granicy unitarnej, podobnie jak dla nieoddziałującego gazu Fermiego, równanie stanu



Rysunek 1.8: Wynik eksperymentalnej weryfikacji twierdzenia o wiriale dla gazu atomów ${}^6\text{Li}$ znajdującego się w granicy unitarnej. Wielkość $\langle x^2 \rangle$ jest miarą średniej energii potencjalnej tzn.: $\langle x^2 \rangle \sim \langle U \rangle$. E_0 jest energią stanu podstawowego. Linia przerywana przedstawia dopasowanie: $\langle x^2 \rangle / \langle x^2(0) \rangle = 1.03(0.02)E/E_0$. Rysunek z publikacji [58].

spełnia zależność:

$$PV = \frac{2}{3}E. \quad (1.32)$$

Dodatkowo jeśli cząstki umieścimy w pułapce harmoniczej opisanej przez potencjał $U(\mathbf{r})$, oraz zachodzi stan równowagi mechanicznej, tzn. spełnione jest równanie:

$$\vec{\nabla}P(\mathbf{r}) = -n(\mathbf{r})\vec{\nabla}U(\mathbf{r}), \quad (1.33)$$

to korzystając z (1.32) otrzymamy:

$$N\langle U \rangle = \frac{E}{2}, \quad (1.34)$$

gdzie $\langle U \rangle$ jest średnią energią potencjalną na cząstkę. W związku z tym uniwersalność wymaga aby dla granicy unitarnej spełnione było twierdzenie o wiriale dla nieoddziałującego gazu Fermiego. Równanie (1.34) można przepisać w równoważnej formie:

$$E(T_1)/E(T_0) = \langle U \rangle_{T_1} / \langle U \rangle_{T_0}. \quad (1.35)$$

Zależność ta została potwierdzona eksperymentalnie z wykorzystaniem gazu atomów ${}^6\text{Li}$ [58]. Wynik eksperymentu przedstawia rysunek 1.8.

Uniwersalność reżimu unitarnego fizycznie oznacza, że wszystkie układy, dla których oddziaływanie jest krótkozasięgowe ($p_{\text{F}}r_{\text{eff}} \rightarrow 0$) i silnie przyciągające ($p_{\text{F}}a \rightarrow \pm\infty$), mają takie same właściwości termodynamiczne przy bardzo niskich gęstościach. Dzięki temu, poprzez

eksperymenty z udziałem zimnych gazów atomowych, możemy badać układy, które mają właściwości zbliżone do innych układów silnie oddziałujących, np. do rozrzedzonej materii neutronowej lub plazmy kwarkowo-gluonowej.

1.4 Rozrzedzona materia neutronowa

Materia neutronowa już od ponad 40 lat w szczególny sposób przyciąga uwagę fizyków jądrowych i astrofizyków. Wynika to głównie z ciągłego braku zadowalającego modelu gwiazdy neutronowej. Aby zrozumieć właściwości gwiazdy neutronowej musimy wcześniej dogłębnie zrozumieć fizykę jednorodnej materii neutronowej, począwszy od bardzo małych gęstości $\rho \sim 0.001 \rho_0$ (spodziewana gęstość gazu neutronów w skorupie gwiazdy) aż po gęstości bardzo wysokie $\rho \sim 10 \rho_0$ (spodziewana gęstość w jądrze gwiazdy), gdzie $\rho_0 = 0.16 \text{ fm}^{-3}$ jest gęstością nasycenia symetrycznej materii jądrowej [59, 60]. W kontekście ewolucji gwiazdy neutronowej istotne jest również uwzględnienie dodatkowo wpływu temperatury na właściwości fizyczne materii neutronowej. Przykładem kluczowej wielkości dla poprawnego opisu ewolucji termicznej gwiazdy neutronowej jest ciepło właściwe, które silnie zależy zarówno od temperatury jak również od stanu w jakim znajduje się materia neutronowa (nadciekły/normalny) [61]. Choć intensywne prace teoretyczne nad zbadaniem właściwości materii neutronowej trwają od wielu lat, problem pozostaje wciąż otwarty.

Od strony teoretycznej podstawowym problemem ograniczającym naszą zdolność poznawczą układów jądrowych jest brak znajomości dokładnej postaci oddziaływania nukleon-nukleon. W rachunkach teoretycznych najczęściej wykorzystuje się efektywne oddziaływania nukleon-nukleon w ośrodku jądrowym np. typu Skyrme'a lub Gogny [62]. Jednak oddziaływania takie tworzone są głównie z myślą o zastosowaniach do badania właściwości jąder atomowych, a więc układów jądrowych o gęstościach bliskich gęstości nasycenia ρ_0 oraz małej asymetrii izospinowej. Stosowanie tego typu oddziaływań do układów jądrowych o gęstościach znacznie poniżej i powyżej gęstości nasycenia prowadzi do generowania mało wiarygodnych wyników.

Sytuacja wydaje się być znacznie prostsza w przypadku niskich gęstości. Wiadomo, że w przypadku niskich gęstości $\rho \lesssim 0.03 \rho_0$ ($p_F \lesssim 0.6 \text{ fm}^{-1}$) właściwości materii neutronowej można poprawnie opisać za pomocą oddziaływania scharakteryzowanego za pomocą dwóch parametrów: długości rozpraszania a i zasięgu efektywnego r_{eff} . Wkłady wyższych rzędów

do amplitudy rozpraszania jak również wkład od oddziaływania trójciałowego można pominąć przy tych gęstościach [63, 64, 65]. W przypadku oddziaływania neutron-neutron wartości parametrów a i r_{eff} zostały eksperymentalnie wyznaczone na podstawie eksperymentów rozproszeniowych niskoenergetycznych neutronów i wynoszą [3]:

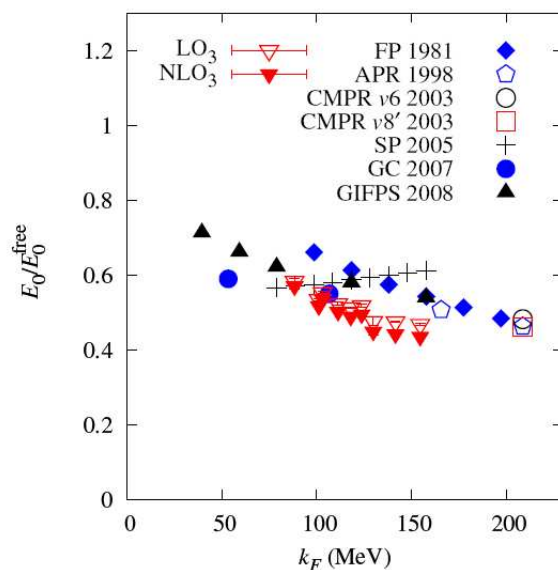
$$a = -18.8 \pm 0.3 \text{ fm}, \quad r_{\text{eff}} = 2.75 \pm 0.11 \text{ fm}. \quad (1.36)$$

Duża i ujemna wartość długości rozpraszania oznacza, że oddziaływanie ma charakter silnego oddziaływania przyciągającego, podobnie jak dla gazów atomowych w reżimie unitarnym. Należy jednak podkreślić, że w przeciwieństwie do gazów atomowych wpływ zasięgu efektywnego na właściwości fizyczne układu nie może zostać pominięty [66, 67]. Dodatkowo w obszarze, gdzie $p_F r_{\text{eff}} > 1$, wpływ zasięgu efektywnego nie może zostać uwzględniony w sposób perturbacyjny. Tak więc, chociaż w granicy małych gęstości znika problem braku znajomości oddziaływania to cały czas pozostaje zagadnieniem otwartym dokładne rozwiązanie problemu wielociałowego w sposób nieperturbacyjny.

Podstawową wielkością, którą próbuje się dokładnie wyznaczyć od wielu lat, jest równanie stanu dla materii neutronowej. Istnieje duża liczba prac dotyczących równania stanu dla rozrzedzonej materii neutronowej. Ogromna większość tych rachunków wykonanych jest dla temperatury zera bezwzględnego [64, 68, 69, 70, 71, 72, 73, 74, 75, 76, 77, 78, 79, 46, 80, 81, 82, 83]. Wyniki tych rachunków, układają się w pobliżu wartości $E(\rho) \approx 0.5E_{\text{fg}}(\rho)$ dla gęstości z zakresu od $0.01\rho_0$ do $0.5\rho_0$. Zależność ta jest zbliżona do zależności jaką otrzymano dla gazów atomowych w reżimie unitarnym (np. dla granicy unitarnej znaleziono $E \approx 0.44E_{\text{fg}}$, patrz podrozdział 1.3.3). Rysunek 1.9 przedstawia porównanie wyników energii stanu podstawowego dla rozrzedzonej materii neutronowej z kilku wybranych prac.

Znacznie mniej wiadomo o równaniu stanu dla temperatur wyższych od zera. Dotychczasowa wiedza opiera się głównie na wynikach otrzymanych w ramach teorii średniego pola lub efektywnych teorii pola [84, 85, 86, 87]. Dzięki znacznemu wzrostowi mocy obliczeniowych komputerów, od roku 2000 zaczynają się pojawiać również wyniki obliczeń typu *ab initio* dla temperatur skończonych [37, 38, 88, 89, 90, 91]. Nadal jednak problem wyznaczenia właściwości termodynamicznych materii neutronowej pozostaje otwarty.

Kolejnym ważnym zagadnieniem jest zbadanie stanu nadciekłego materii neutronowej, który pojawia się w bardzo niskich temperaturach. Wyniki takich badań są szczególnie ważne dla opisu zjawiska transportu ciepła a co za tym idzie termicznej ewolucji gwiazdy neutronowej [61, 92, 93, 94, 95]. Uważa się również, że wiedza ta może pomóc zrozumieć strukturę

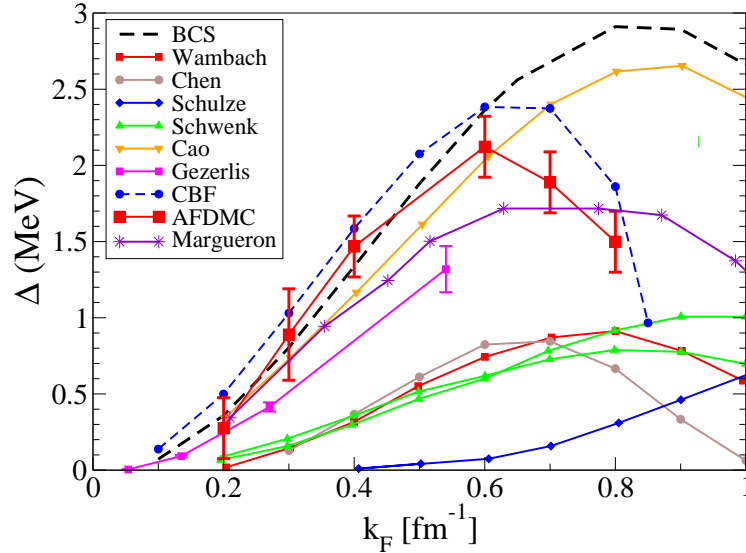


Rysunek 1.9: Porównanie energii stanu podstawowego materii neutronowej w jednostkach energii nieoddziałującego gazu Fermiego dla temperatury zera bezwzględnego. Wyniki z publikacji: LO₃ i NLO₃ [81], FP 1981 [70], APR 1998 [71], CMPR v6 2003 i CMPR v8' 2003 [76], SP 2005 [66], GC 2007 [46], GIFPS 2008 [80]. Rysunek z publikacji [81].

słabo związanych, neutronowo nadmiarowych jąder, znajdujących się blisko linii oderwania [96, 97, 98, 99]. Z tego powodu wkłada się wiele wysiłku w dokładne zbadanie zachowania się szczeliny energetycznej w funkcji gęstości i temperatury.

W obszarze niskich gęstości szczelina energetyczna dla temperatury zera bezwzględnego Δ_0 została wyznaczona w ramach przybliżenia BCS. Wyniki tych obliczeń pokazały, że wszystkie oddziaływania neutron-neutron prowadzą do tej samej zależności wartości szczeliny $\Delta_0^{(BCS)}$ w funkcji gęstości [100, 101]. Nie jest to zaskoczeniem, gdyż wszystkie potencjały oddziaływania są tworzone w taki sposób aby poprawnie odtwarzać przesunięcia fazowe w fali S i P . Jednak wyniki obliczeń wychodzących poza przybliżenie BCS prowadzą do wartości szczeliny energetycznej istotnie różnej niż $\Delta_0^{(BCS)}$ (zazwyczaj znacznie mniejszej). Te znaczące zmiany tłumaczy się istnieniem tzw. *efektów polaryzacyjnych*, czyli włączeniem do obliczeń dodatkowych efektów (niż pole średnie) związanych z oddziaływaniem cząstki z otaczającym ośrodkiem. Rysunek 1.10 przedstawia porównanie wyników dla szczeliny energetycznej otrzymanej za pomocą różnych metod. Widać, że otrzymane wyniki mocno zależą od wykorzystanej metody obliczeniowej. Odzwierciedla to fakt, że nasza wiedza o korelacjach, które pojawiają się w układzie, jest bardzo mała.

Jeszcze skromniejsza jest nasza wiedza na temat zachowania się szczeliny energetycznej



Rysunek 1.10: Szczelina energetyczna dla temperatury zera bezwzględnego w funkcji gęstości. Porównanie wyników otrzymanych różnymi metodami. Wyniki pochodzą z prac: Wambach [102], Chen [103], Schulze [104] (BCS+RPA), Schwenk [105] (metoda grupy renormalizacyjnej), Cao [106] (teoria Bruecknera), Gezerlis [46] (kwantowe Monte Carlo), CFB [107] (baza funkcji skorelowanych), AFDMC [80] (kwantowe Monte Carlo), Margueron [108] (Hartree-Fock-Bogoliubow). Dla porównania dodane również zostały wyniki teorii BCS.

w funkcji temperatury. Poza wynikami otrzymanymi w ramach teorii BCS nie istnieją wyniki bardziej dokładnych obliczeń np. uwzględniających efekty polaryzacyjne. Również bardzo ważne, z punktu widzenia teorii termicznej ewolucji gwiazdy neutronowej, jest wyznaczenie temperatury krytycznej T_c przejścia fazowego pomiędzy fazą normalną i nadcięłą. Ostatnie wyniki obliczeń wskazują, że w przypadku rozrzedzonej materii neutronowej wartość temperatury krytycznej z dobrym przybliżeniem można wyznaczyć korzystając z dobrze znanej relacji z teorii BCS - $\Delta_0/T_c \approx 1.76$ [91].

Jak dotychczas, nie dysponujemy technikami laboratoryjnymi, które pozwoliłyby na zbadanie eksperymentalnie właściwości materii neutronowej zarówno w funkcja gęstości jak i temperatury⁵. Z tego powodu jedynymi metodami, które mają szansę przybliżyć nas do poznania prawdziwej natury materii neutronowej są obliczenia typu *ab initio*, np. kwantowe Monte Carlo.

⁵Wyjątkiem jest przypadek bardzo niskich gęstości ($k_F \lesssim 0.06\text{fm}^{-1}$), gdzie jedyną wielkością charakteryzującą oddziaływanie jest długość rozpraszania. W tej granicy o właściwościach materii neutronowej można wnioskować na podstawie wyników otrzymanych w eksperymentach z udziałem fermionowych gazów atomowych.

Rozdział 2

Metody teoretyczne

Współczesne eksperymenty z udziałem zimnych gazów atomowych dostarczają ogromnej ilości wyników, które należy wyjaśnić od strony teoretycznej. Największe wyzwanie dla teorii stanowi poprawne opisanie reżimu unitarnego, w szczególności granicy unitarnej. W rozdziale tym zostanie przedstawiony krótki przegląd podejść teoretycznych, które zostały dotychczas wykorzystane do opisu gazu atomów znajdujących się w reżimie unitarnym. Zostaną przedstawione główne założenia opisanych metod jak również najważniejsze wyniki otrzymane za ich pomocą.

2.1 Metoda Kwantowego Monte Carlo dla temperatury zera bezwzględnego

Metody oparte o idee całkowania Monte Carlo, wykorzystywane do wyznaczania właściwości kwantowych układów wielociałowych, uważa się obecnie za najdokładniejsze. W szczególności, tzw. metody dyfuzyjnego Monte Carlo (ang. *Diffusion Monte Carlo*) lub kwantowego Monte Carlo z funkcją Greena (ang. *Green Function Monte Carlo*) wykorzystano do wyznaczenia właściwości lekkich jąder, aż do jądra ^{12}C , otrzymując wyniki, które są w bardzo dobrej zgodzie z danymi eksperymentalnymi [109, 110, 111]. Metody te również wykorzystywane są do wyznaczania właściwości zimnych gazów atomowych jak również materii jądrowej. Ponieważ będą one stanowiły podstawowe źródło danych, z którymi będą porównywane wyniki otrzymane w ramach tej rozprawy, w podrozdziale tym zostaną one dokładniej opisane, ze szczególnym zwróceniem uwagi na ich ograniczenia. Istniejące ograniczenia w konsekwencji mogą być źródłem rozbieżności wyników, obserwowanych w pewnych przypadkach.

2.1.1 Kwantowa wariacyjna metoda Monte Carlo

Metoda wariacyjnego Monte Carlo (ang. *Variational Monte Carlo*, VMC) bazuje na zasadzie wariacyjnej Rayleigha-Ritza [29]:

$$E_T = \frac{\int d\mathcal{R} \psi_T^* \hat{H} \psi_T}{\int d\mathcal{R} \psi_T^* \psi_T} \geq E_0, \quad (2.1)$$

gdzie E_0 jest energią stanu podstawowego, ψ_T próbną funkcją falową opisującą układ N cząstek, $\mathcal{R} = \{\mathbf{r}_1 \lambda_1, \mathbf{r}_2 \lambda_2, \dots, \mathbf{r}_N \lambda_N\}$ punktem w przestrzeni konfiguracyjnej, gdzie \mathbf{r}_i i λ_i są odpowiednio położeniem i spinem i -tej cząstki. Występującą całkę wielowymiarową oblicza się wykorzystując całkowanie Monte Carlo, przepisując równanie (2.1) do postaci:

$$E_T = \frac{\int d\mathcal{R} |\psi_T|^2 \frac{\hat{H}\psi_T}{\psi_T}}{\int d\mathcal{R} |\psi_T|^2}. \quad (2.2)$$

Ponieważ wielkość $|\psi_T|^2 \geq 0$, można ją wykorzystać jako „wagę dla próbkowania”, tzn. energię próbną E_T obliczamy jako średnią ważoną z „energii lokalnej” E_L :

$$E_T \simeq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N E_L(\mathcal{R}_i), \quad (2.3)$$

gdzie punkty \mathcal{R}_i zostały wylosowane z rozkładu $|\psi_T|^2$ oraz:

$$E_L(\mathcal{R}) = \frac{\hat{H}\psi_T(\mathcal{R})}{\psi_T(\mathcal{R})}. \quad (2.4)$$

Zauważmy, że energia lokalna E_L staje się stałą liczbą w przypadku gdy funkcja próbną ψ_T pokrywa się z funkcją własną hamiltonianu. W pozostałych przypadkach energia lokalna jest funkcją \mathcal{R} . Jej wariancję można wykorzystać jako miarę dokładności odtwarzania przez funkcję próbną stanu własnego.

Odpowiedni wybór funkcji próbnej ψ_T jest kluczowy dla metody VMC. W przypadku silnie skorelowanych układów fermionowych zazwyczaj wykorzystuje się funkcję próbną w postaci (zobacz [79] i podane tam referencje):

$$\psi_T(\mathcal{R}) = F_J(\mathcal{R})D(\mathcal{R}). \quad (2.5)$$

Funkcja F_J jest skorelowaną funkcją Jastrowa, która jest symetryczna ze względu na zamianę cząstek miejscami oraz niezależna od spinów cząstek. Ogólną postać tej funkcji można zapisać jako:

$$F_J(\mathcal{R}) = \prod_{i < j} f(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|), \quad (2.6)$$

gdzie funkcja $f(r)$ jest rozwiązaniem równania dla małych $r < d$:

$$-\frac{\nabla^2}{m}f(r) + V(r)f(r) = \lambda f(r). \quad (2.7)$$

$V(r)$ jest niezależną od spinów częścią oddziaływania. Dla odległości $r > d$ przyjmuje się $f(r > d) = 1$. Parametr d traktuje się jako parametr wariacyjny. Zadaniem funkcji Jastrowa jest uwzględnienie w funkcji próbnej krótkozasięgowych korelacji par.

Część antysymetryczną $D(\mathcal{R})$ wybiera się w postaci wyznacznika Slatera:

$$D(\mathcal{R}) = \det \{ \phi_\alpha(\mathbf{r}_i, \lambda_i) \}, \quad (2.8)$$

gdzie α jest zbiorem liczb kwantowych definiującym stany jednocząstkowe ϕ_α , które zależą również od dodatkowych parametrów wariacyjnych. Dokładną postać stanów jednocząstkowych ustala się w zależności od rozważanego układu. Dla układów jednorodnych zazwyczaj przyjmuje się je w postaci fal płaskich.

Podsumowując, metoda VMC jest potężnym narzędziem do wyznaczania stanów własnych hamiltonianu (zazwyczaj stanu podstawowego), która wykorzystuje podejście wariacyjne. Siłą tej metody polega na elastyczności dotyczącej wyboru funkcji próbnej. W istocie metoda ta może pracować z dowolnie zaproponowaną funkcją próbną. Główną wadą tej metody, podobnie jak każdej innej metody opartej na podejściu wariacyjnym, jest to, że dostarcza ona jedynie górnego ograniczenia na energie własne hamiltonianu.

2.1.2 Dyfuzyjna metoda kwantowego Monte Carlo

Dyfuzyjna metoda kwantowego Monte Carlo (ang. *Diffusion Monte Carlo*, DMC) jest metodą, która rzutuje funkcje próbną ψ_T na stan podstawowy (pod warunkiem, że funkcja próbna nie jest ortogonalna do stanu podstawowego). W zasadzie metoda ta jest dokładna, chociaż aby ją wykorzystać w praktyce należy wykonać dodatkowe przybliżenia. W dalszej części zostanie przedstawiony tylko wariant metody DMC wykorzystywany w przypadku, gdy oddziaływanie pomiędzy cząstkami jest niezależne od spinów (tylko takie oddziaływania są rozważane w tej rozprawie). W takiej sytuacji metoda ta pokrywa się dokładnie z tzw. kwantową metodą Monte Carlo z funkcją Greena (ang. *Green Function Monte Carlo*, GFMC) [79, 112].

Rozważmy funkcję próbną ψ_T zapisaną w bazie funkcji własnych $\{ \phi_n \}$ rozważanego hamiltonianu:

$$\psi_T(\mathcal{R}) = \psi(\mathcal{R}, 0) = \sum_n c_n \phi_n(\mathcal{R}). \quad (2.9)$$

Dokonując ewolucji ψ_T w czasie urojonym $\tau = it$ otrzymujemy:

$$\psi(\mathcal{R}, \tau) = e^{-\hat{H}\tau} \psi(\mathcal{R}, 0) = \sum_n c_n e^{-E_n \tau} \phi_n(\mathcal{R}). \quad (2.10)$$

Zatem w granicy $\tau \rightarrow \infty$ funkcja próbna dąży do funkcji falowej stanu podstawowego:

$$\psi(\mathcal{R}, \tau \rightarrow \infty) = c_0 e^{-E_0 \tau} \phi_0(\mathcal{R}). \quad (2.11)$$

Aby zniwelować wpływ czynnika $e^{-E_0 \tau}$, który powoduje, że dla dużych wartości τ rozwiązanie zanika wykładniczo, ewolucję w czasie urojonym wykonuje się za pomocą operatora $e^{-(\hat{H}-E_T)\tau}$, gdzie zakładamy, że $E_T \simeq E_0$ oraz $E_T \geq E_0$. Łatwo można zauważyć, że jako funkcję próbną ψ_T oraz wartość E_T wygodnie jest wybrać rozwiązanie otrzymane metodą VMC.

Z praktycznego punktu widzenia, ewolucję w czasie urojonym wygodniej jest wykonać wykorzystując funkcję Greena:

$$\psi(\mathcal{R}, \tau) = \int d\mathcal{R}' G(\mathcal{R}, \mathcal{R}', \tau) \psi(\mathcal{R}', 0), \quad (2.12)$$

dzięki czemu problem sprowadzamy do postaci całkowej, co pozwoli na wykorzystanie metody Monte Carlo. Zakładając, że hamiltonian układu ma postać $\hat{H} = \sum_i \frac{-\nabla_i^2}{2m} + V(\mathcal{R})$ oraz wykonując dekompozycję Trottera, dla małych wartości czasu urojonego $\Delta\tau \rightarrow 0$, funkcję Greena można zapisać jako [79]:

$$G(\mathcal{R}, \mathcal{R}', \Delta\tau) \approx \exp\left[-\frac{V(\mathcal{R}) + V(\mathcal{R}')}{2} \Delta\tau\right] G_0(\mathcal{R}, \mathcal{R}', \Delta\tau), \quad (2.13)$$

gdzie G_0 jest funkcją Greena dla układu nieoddziałującego:

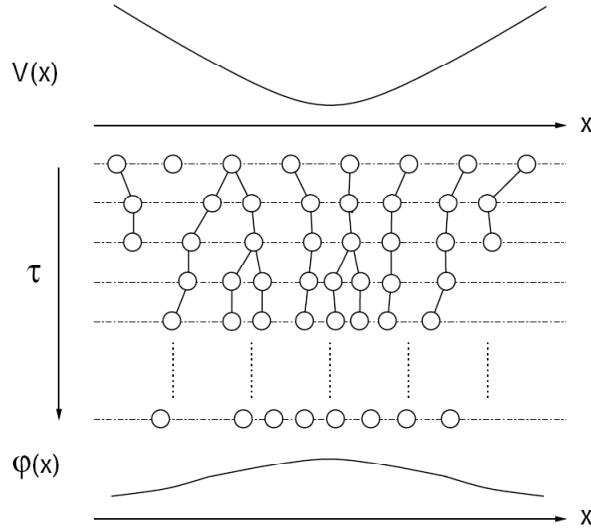
$$G_0(\mathcal{R}, \mathcal{R}', \tau) = \left(\frac{m}{2\pi\tau}\right)^{\frac{3N}{2}} \exp\left[-\frac{m|\mathcal{R} - \mathcal{R}'|^2}{2\tau}\right]. \quad (2.14)$$

Równanie całkowe (2.12) rozwiązujemy wykorzystując metodę Monte Carlo. W tym celu funkcję falową $\psi(\mathcal{R})$ przedstawiamy jako zbiór N_w konfiguracji (punktów) \mathcal{R}_k (ang. *walkers*):

$$\psi(\mathcal{R}) = \sum_{k=1}^{N_w} \delta(\mathcal{R} - \mathcal{R}_k). \quad (2.15)$$

Pierwotnie konfiguracje \mathcal{R}_k wybrane są w taki sposób aby odzwierciedlały funkcję próbną ψ_T . Ewolucję w czasie urojonym dzielimy na n kroków, gdzie $\tau = n\Delta\tau$. W każdym kroku czasowym konfiguracje \mathcal{R}_k zaburzamy losowo zgodnie z „członem dyfuzyjnym” G_0 , tzn. każda nowa konfiguracja \mathcal{R}' jest generowana zgodnie z: $\mathcal{R}' = \mathcal{R} + \eta$, gdzie η jest losowym wektorem liczb, wygenerowanym z rozkładu G_0 . Człon:

$$w = \exp\left[-\left(\frac{V(\mathcal{R}) + V(\mathcal{R}')}{2} - E_T\right) \Delta\tau\right], \quad (2.16)$$



Rysunek 2.1: Idea algorytmu DMC. Za pomocą kół zostały przedstawione konfiguracje \mathcal{R}_k w każdym kolejnym kroku czasowym. Po odpowiednio długiej ewolucji w czasie urojonym, rozkład konfiguracji \mathcal{R}_k jest proporcjonalny do funkcji falowej stanu podstawowego. Rysunek z publikacji [112].

jest uwzględniany za pomocą tzw. metody dzielenia (ang. *branching technique*), która określa prawdopodobieństwo zwielokrotnienia danej konfiguracji \mathcal{R}_k w następnym kroku, tj. zamiast konfiguracji \mathcal{R}_k w następnym kroku pojawia się $n = [w + \xi]$ powtórzeń tej konfiguracji, gdzie $\xi \in [0, 1]$ jest liczbą losową, $[x]$ oznacza część całkowitą. Idea algorytmu została przedstawiona na rysunku 2.1 dla przypadku jednowymiarowego. Po wykonaniu odpowiednio długiej ewolucji w czasie urojonym, rozkład konfiguracji \mathcal{R}_k jest proporcjonalny do funkcji falowej stanu podstawowego i może zostać wykorzystany do wyznaczenia właściwości fizycznych układu w stanie podstawowym.

W praktycznych zastosowaniach, opisana powyżej metoda jest mało wydajna (głównie z powodu dużych fluktuacji wagi w wykorzystywanej w metodzie dzielenia). Aby zmniejszyć wariancje estymatorów, ewolucję w czasie urojonym wykonuje się wykorzystując zmodyfikowaną funkcję Greena:

$$\tilde{G}(\mathcal{R}, \mathcal{R}', \Delta\tau) = \frac{\psi_T(\mathcal{R}')}{\psi_T(\mathcal{R})} G(\mathcal{R}, \mathcal{R}', \Delta\tau), \quad (2.17)$$

gdzie zakłada się, że ψ_T (zwana funkcją ważności) dobrze przybliża stan podstawowy. W takim przypadku łatwo można pokazać, że w wyniku ewolucji w czasie urojonym, wykonywanej obecnie zmodyfikowaną funkcją Greena \tilde{G} , w granicy $\tau \rightarrow \infty$ otrzymujemy:

$$\psi(\mathcal{R}, \tau \rightarrow \infty) = \psi_T(\mathcal{R})\phi_0(\mathcal{R}). \quad (2.18)$$

Uwzględnienie funkcji ważności powoduje, że człon dyfuzyjny (odpowiedzialny za modyfikację konfiguracji \mathcal{R}_k) oraz waga w (wykorzystywana w metodzie dzielenia) przyjmują postać:

$$G_0 \rightarrow \tilde{G}_0(\mathcal{R}, \mathcal{R}', \Delta\tau) = \left(\frac{1}{2\pi D \Delta\tau} \right)^{\frac{3N}{2}} \exp \left[-\frac{\left| \mathcal{R} - \mathcal{R}' + D \Delta\tau \frac{\nabla \psi_T(\mathcal{R})}{\psi_T(\mathcal{R})} \right|^2}{2D \Delta\tau} \right], \quad (2.19)$$

$$w \rightarrow \tilde{w} = \exp \left[-\left(\frac{E_L(\mathcal{R}) + E_L(\mathcal{R}')}{2} - E_T \right) \Delta\tau \right], \quad (2.20)$$

gdzie $D = 1/m$ oraz energia lokalna wyraża się przez:

$$E_L(\mathcal{R}) = -\frac{1}{2m} \frac{\nabla^2 \psi_T(\mathcal{R})}{\psi_T(\mathcal{R})} + V(\mathcal{R}). \quad (2.21)$$

Widoczne jest zatem, że procedura ta prowadzi do małych fluktuacji \tilde{w} a co za tym idzie do mniejszej wariancji estymatorów obliczanych wielkości fizycznych.

Metoda DMC produkuje stan podstawowy układu jako rozkład konfiguracji \mathcal{R}_k w przestrzeni konfiguracyjnej. Ponieważ gęstość tego rozkładu traktujemy jako funkcję falową w praktyce oznacza to, że metodę można wykorzystywać tylko do badania układów, gdzie stan podstawowy jest funkcją rzeczywistą i nieujemną. Przykładem takich układów są układy bozonowe. Dla układów fermionowych w ogólności nie można spełnić tego warunku, z uwagi na antysymetryczność funkcji falowej (tzw. problem znaku). Aby metodę można było wykorzystywać do rozwiązywania problemów fermionowych wymagane jest wprowadzenie pewnych przybliżeń.

W przypadku, gdy spodziewamy się, że funkcja falowa stanu podstawowego jest funkcją rzeczywistą, najczęściej stosuje się algorytm polegający na sztucznym podzieleniu przestrzeni konfiguracyjnej na obszary gdzie funkcja falowa jest dodatnia i ujemna (ang. *fixed-node approximation*). Definiuje się (w sposób arbitralny) hiperpowierzchnię w przestrzeni konfiguracyjnej, na której funkcja falowa przyjmuje wartość zero. Jeśli w trakcie kroku dyfuzyjnego, dla ustalonej konfiguracji \mathcal{R}_k przesunięcie η prowadzi do przekroczenia wyznaczonej hiperpowierzchni, krok ten się anuluje. Można pokazać, że zastosowanie tej procedury prowadzi zawsze do otrzymania górnego ograniczenia dla energii stanu podstawowego, podobnie jak ma to miejsce dla metody VMC [113].

Dla klasy problemów, gdzie spodziewamy się że funkcja falowa stanu podstawowego jest funkcją zespoloną, najczęściej stosuje się algorytm polegający na ograniczeniu ruchów dyfuzyjnych tylko do tych dla których $Re[\psi_T(\mathcal{R}')]/Re[\psi_T(\mathcal{R})] > 0$ (ang. *constrained-path approximation*) lub do tych dla których fazy funkcji $\psi_T(\mathcal{R})$ i $\psi_T(\mathcal{R}')$ są takie same (ang. *fixed-phase approximation*), gdzie \mathcal{R} i \mathcal{R}' oznaczają odpowiednio konfigurację przed i po kroku dyfuzyj-

nym. Ważnym jest aby dodać, że w tym przypadku wspomniane powyżej przybliżenia nie zawsze prowadzą do górnego ograniczenia dla energii stanu podstawowego [114].

Pomimo wspomnianych trudności występujących w metodzie DMC, jest ona uznawana za jedną z najdokładniejszych metod wyznaczania właściwości układu w stanie podstawowym. Jej główna zaleta wynika z faktu, że można ją uogólnić w taki sposób aby mogła pracować z bardziej złożonymi oddziaływaniami, które zależą od spinów i izospinów cząstek. Rozszerzenie tej metody w literaturze znane jest jako metoda dyfuzyjnego Monte Carlo z polem pomocniczym (ang. *Auxiliary Field Diffusion Monte Carlo*) [79].

2.2 Przegląd przybliżonych metod teoretycznych wykorzystanych do opisu reżimu unitarnego

W części tej zostaną opisane metody przybliżone, które wykorzystano do opisu zimnych gazów atomowych w reżimie unitarnym. Skupimy się głównie na porównaniu przewidywań tych podejść z wynikami obliczeń dokładnych, typu Monte Carlo. Pomimo, że w wielu przypadkach podejścia przybliżone nie odtwarzają poprawnie właściwości badanego układu, to w przeciwieństwie do podejść Monte Carlo, pozwalają one na zbudowanie pewnej „intuicji fizycznej” dotyczącej fizyki tych układów.

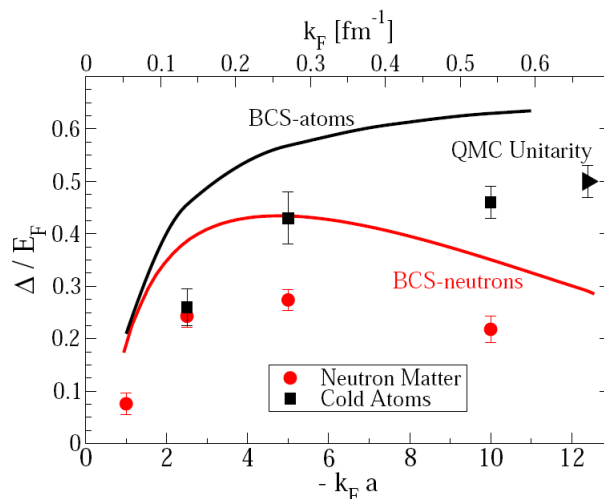
2.2.1 Przybliżenie BCS

Teoria BCS odniosła ogromny sukces wyjaśniając właściwości prostych nadprzewodników [29]. Z tego powodu interesującym jest przyjrzenie się przewidywaniom tej teorii zastosowanej do reżimu unitarnego.

W wyniku prac zapoczątkowanych w latach 70-tych, wyznaczono podstawowe właściwości układu (np. równanie stanu, szczelinę energetyczną, temperaturę krytyczną przejścia fazowego) dla stałych sprzężenia, obejmujących zarówno reżim unitarny jak i przypadki graniczne (reżimy BCS i BEC) zakładając, że stan podstawowy ma strukturę typu BCS [23, 115, 116]:

$$|\text{BCS}\rangle = \prod_{\mathbf{k}>0} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger}) |0\rangle. \quad (2.22)$$

W kolejnych latach pojawiły się obliczenia wychodzące poza przybliżenie pola średniego, np. przybliżenie faz przypadkowych, jak również obliczenia uwzględniające efekty związane z niejednorodnością układu, co jest konsekwencją umieszczenia atomów w pułapce [117, 118, 119,



Rysunek 2.2: Porównanie szczeliny energetycznej otrzymanej w ramach teorii BCS i obliczeń Monte Carlo dla zimnych gazów atomowych oraz rozrzedzonej materii neutronowej. Rysunek z publikacji [46].

120, 121, 122, 123, 124, 125]. W ogólności w granicy niskich temperatur przybliżenie BCS daje jakościowo poprawne wyniki, jednakże obserwuje się znaczące rozbieżności dotyczące wyników ilościowych, porównując je z wynikami Monte Carlo lub wynikami eksperymentalnymi. Jako przykład porównajmy wartość energii stanu podstawowego dla granicy unitarnej, która w przybliżeniu BCS przyjmuje wartość $E^{(BCS)}/E_{fg} \approx 0.59$ [23] podczas gdy wartość otrzymana eksperymentalnie jak również w ramach obliczeń Monte Carlo to $E/E_{fg} \approx 0.40$ (patrz tabela 1.2). Widać zatem, że przybliżenie BCS przeszacowuje energię stanu podstawowego o około 50%, co należy uznać za duży błąd. Rysunek 2.2 przedstawia porównanie szczeliny energetycznej otrzymanej w ramach teorii BCS i obliczeń Monte Carlo dla zimnych gazów atomowych oraz rozrzedzonej materii neutronowej. Widoczne jest, że teoria BCS w sposób jakościowy poprawnie odtwarza tę wielkość ale podobnie jak dla energii stanu podstawowego, obserwuje się duże rozbieżności ilościowe.

Chociaż dla temperatury zera bezwzględnego podejście BCS prowadzi do jakościowo poprawnych wyników, to należy się spodziewać, że w temperaturach skończonych przewidywania będą niepoprawne. Łatwo można to zauważyć przypominając, że dla układu w reżimie unitarnym zidentyfikowano dwie charakterystyczne temperatury, zobacz dyskusja w podrozdziale 1.3.1 oraz rysunek 1.4. Teoria BCS nie dopuszcza istnienia dwóch charakterystycznych temperatur.

2.2.2 Metoda funkcjonału gęstości

Metoda funkcjonału gęstości (ang. *Density Functional Theory*, DFT) jest potężną metodą powszechnie stosowaną dla układów elektronowych do wyznaczania ich właściwości (przede wszystkim energii stanu podstawowego). Obserwuje się również ciągły wzrost znaczenia tej metody wśród metod wykorzystywanych do badania układów silnie skorelowanych, np. jąder atomowych. Idea metody opiera się na twierdzeniu Hohenberga-Kohna, które głosi, że gęstość elektronów w stanie podstawowym $n_0(\mathbf{r})$ umieszczonych w zewnętrznym potencjale $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ wyznacza ten potencjał w sposób jednoznaczny [126]. Konsekwencją tego twierdzenia jest, że dla dowolnego układu fermionowego znajdującego się w zewnętrznym potencjale $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$, gęstość cząstek w stanie podstawowym $n_0(\mathbf{r})$ minimalizuje pewien funkcjonał:

$$E[n] = F[n] + \int d^3\mathbf{r} n(\mathbf{r})V_{\text{ext}}(\mathbf{r}), \quad (2.23)$$

gdzie $F[n]$ jest pewnym funkcjonałem gęstości układu oraz minimalna wartość funkcjonału jest dokładnie równa energii stanu podstawowego E_0 , tj.: $E_0 = E[n_0] = \min_n E[n]$.

Kluczowym dla całej metody jest poprawne wyznaczenie funkcjonału $F[n]$. W ogólności, z wyjątkiem kilku trywialnych przypadków, postać tego funkcjonału nie jest znana. Jednakże, znaczącego postępu dokonano wykorzystując tzw. przybliżenie lokalnej gęstości (ang. *Local Density Approximation*, LDA) w ramach którego zakłada się, że funkcjonał $F[n]$ można zapisać w postaci:

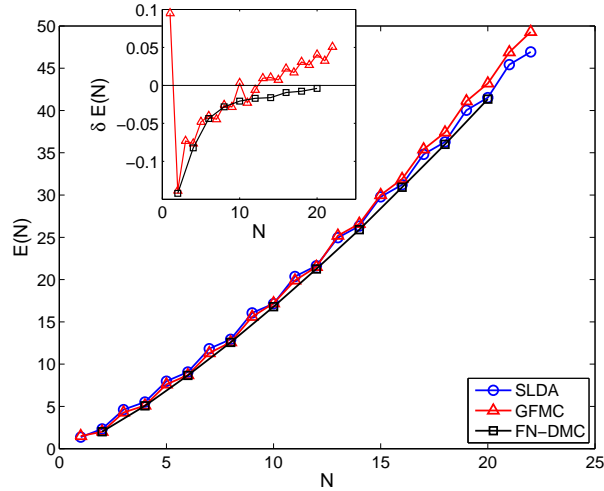
$$F[n, \tau] = \int d^3\mathbf{r} \mathcal{E}_{\text{LDA}}(n(\mathbf{r}), \tau(\mathbf{r})), \quad (2.24)$$

gdzie: $n(\mathbf{r})$ i $\tau(\mathbf{r})$ są odpowiednio lokalną gęstością cząstek oraz lokalną gęstością kinetyczną. W ostatnich latach pojawiło się uogólnienie podejścia LDA również na układy fermionowe, w których występują korelacje par, tzw. SLDA (ang. *Superfluid Local Density Approximation*) [127, 128, 129, 130, 131, 132]. Rozszerzenie tego przybliżenia polega na założeniu, że funkcjonał gęstości zależy dodatkowo od tzw. anormalnej gęstości $\nu(\mathbf{r})$, której zadaniem jest poprawne uwzględnienie efektów związanych z utworzeniem się stanu nadciekłego. A. Bulgac opierając się na analizie wymiarowej założył, że dla gazu unitarnego funkcjonał gęstości ma postać [132]:

$$\mathcal{E}_{\text{SLDA}}(\mathbf{r}) = \alpha \frac{\tau(\mathbf{r})}{2} + \beta \frac{3(3\pi^2)^{2/3} n^{5/3}(\mathbf{r})}{10} + \gamma \frac{|\nu(\mathbf{r})|^2}{n^{1/3}(\mathbf{r})}, \quad (2.25)$$

gdzie gęstości $n(\mathbf{r})$, $\tau(\mathbf{r})$ i $\nu(\mathbf{r})$ dane są przez:

$$n(\mathbf{r}) = 2 \sum_k |v_k(\mathbf{r})|^2, \quad \tau(\mathbf{r}) = 2 \sum_k |\nabla v_k(\mathbf{r})|^2, \quad \nu(\mathbf{r}) = \sum_k v_k^*(\mathbf{r})u_k(\mathbf{r}). \quad (2.26)$$



Rysunek 2.3: Energia stanu podstawowego gazu unitarnego, umieszczonego w zewnętrznym potencjale harmonicznym, otrzymana w ramach przybliżenia SLDA (niebieskie koła). Dla porównania umieszczono wyniki obliczeń Monte Carlo (czerwone trójkąty i czarne kwadraty). Wewnętrzny wykres przedstawia różnice pomiędzy przewidywaniem obliczeń Monte Carlo a przybliżeniem SLDA. Rysunek z publikacji [132].

Funkcje $[u_k(\mathbf{r}), v_k(\mathbf{r})]$ są standardowymi funkcjami falowymi kwazicząstek Bogoliubowa, gdzie k numeruje stany kwazicząstkowe. Stałe α , β i γ zostały dobrane w taki sposób aby poprawnie odtwarzać trzy wielkości opisujące jednorodny gaz unitarny w temperaturze zera bezwzględnej, znane z obliczeń Monte Carlo: E/E_{fg} , μ/ε_F i Δ/ε_F . Tak skonstruowany funkcjonal gęstości okazuje się być dokładnym narzędziem, które można wykorzystać do badania gazu atomów, który uwięziony jest w zewnętrznym polu (np. pułapce optycznej).

Rysunek 2.3 przedstawia energię stanu podstawowego dla gazu unitarnego, umieszczonego w zewnętrznym potencjale harmonicznym $V_{ext}(\mathbf{r}) = m\omega^2 r^2/2$, w funkcji liczby cząstek. Dla porównania na wykresie umieszczono również wyniki obliczeń Monte Carlo. Widoczna jest bardzo dobra zgodność pomiędzy obliczeniami z użyciem przybliżenia SLDA oraz Monte Carlo. Godnym zauważenia jest fakt, że metoda SLDA poprawnie odtwarza układ schodkowy energii stanu podstawowego, który związany jest z tworzeniem się nowej pary Coopera za każdym razem gdy liczba cząstek staje się parzysta. Poprawne odtworzenie tego subtelного szczegółu należy uznać za duże osiągnięcie opisywanej metody.

Pomimo wielu sukcesów jakie odniosło podejście SLDA zastosowane do unitarnego gazu atomów, należy się spodziewać, że podejście to napotka takie same problemy jak teoria BCS w przypadku obliczeń dla temperatur skończonych. Podobnie jak przybliżenie BCS, metoda

DFT nie dopuszcza (w obecnej formie) istnienie dwóch charakterystycznych temperatur a co za tym idzie nie będzie w stanie poprawnie odtworzyć właściwości układu w temperaturach skończonych.

2.2.3 Metoda dynamicznego pola średniego

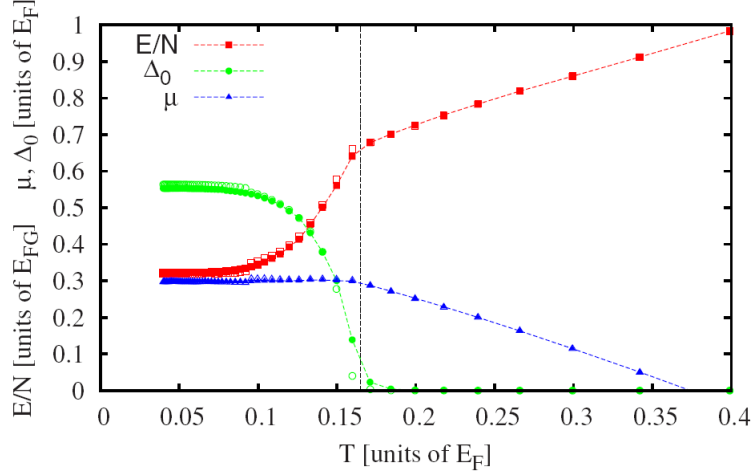
Metoda dynamicznego pola średniego (ang. *Dynamical mean-field theory*, DMFT) została wprowadzona w latach 90-tych i stała się ważnym narzędziem wykorzystywanym do badania silnie skorelowanych układów fermionowych na sieci [133, 134]. Idea metody DMFT polega na zastąpieniu problemu zdefiniowanego na sieci (N_s^3 węzłów sieci, gdzie N_s jest wymiarem sieci) przez problem sieci o jednym węźle, który oddziałuje z zewnętrznym „rezerwuarem” cząstek. Zewnętrzny rezerwuuar tworzą wszystkie pozostałe węzły sieci. Dynamika pojedynczego węzła o indeksie i opisywana jest poprzez efektywne działanie w czasie urojonym, które dla oddziaływanie kontaktowego przyjmuje postać:

$$S_{\text{eff}} = - \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_{\lambda=\uparrow\downarrow} \hat{a}_{i\lambda}^\dagger(\tau) \mathbf{G}_0^{-1}(\tau - \tau') \hat{a}_{i\lambda}(\tau') + U \int_0^\beta d\tau \hat{n}_{i\uparrow}(\tau) \hat{n}_{i\downarrow}(\tau), \quad (2.27)$$

gdzie U jest stałą sprzężenia. Funkcja $\mathbf{G}_0^{-1}(\tau - \tau')$ ma znaczenie efektywnej amplitudy, że cząstka (fermion) zostanie utworzona na izolowanym węźle w chwili τ (pochodząca z zewnętrznego rezerwuaru) i następnie zniszczona w chwili τ' (powróci do zewnętrznego rezerwuaru). Funkcję $\mathbf{G}_0(\tau - \tau')$ można traktować jako pewną efektywną funkcję Greena. Jest oczywiste, że efektywna funkcja Greena \mathbf{G}_0 zależy od dynamiki pozostałych węzłów, które ponownie są opisywane za pomocą efektywnego działania, tj. $\mathbf{G}_0 = \mathbf{G}_0[S_{\text{eff}}]$. Zatem problem należy rozwiązywać w sposób samozgodny. Dokładny układ równań, który należy rozwiązać można znaleźć w publikacji [134].

Metoda dynamicznego pola średniego, podobnie jak inne podejścia średniopolowe, zaniedbuje wpływ pochodzący od fluktuacji przestrzennych, ale w pełni uwzględnia wpływ czasowych fluktuacji na dynamikę węzła (stąd nazwa *dynamiczne pole średnie*).

Wyniki obliczeń dla reżimu unitarnego otrzymane za pomocą metody DMFT prowadzą do wniosku, że metoda ta jest w stanie z zadowalającą dokładnością opisać układ silnie oddziałujących fermionów, jakim jest gaz zimnych atomów [135, 136, 137, 138, 139, 140]. Dla granicy unitarnej otrzymana za pomocą tej metody wartość energii stanu podstawowego wynosi $E^{(DMFT)}/E_{\text{fg}} \simeq 0.44$, co bardzo dobrze zgadza się z wartością otrzymaną eksperymentalnie jak również w ramach obliczeń Monte Carlo. Rysunek 2.4 przedstawia równanie



Rysunek 2.4: Równanie stanu, potencjał chemiczny oraz parametr porządku $\Delta_0 = U\langle T\hat{a}_\uparrow^\dagger(0^+)\hat{a}_\downarrow(0)\rangle$ otrzymane za pomocą metody dynamicznego pola średniego. Linia przerywana oznacza temperaturę krytyczną przejścia fazowego $T_c^{(DMFT)} \simeq 0.16 \varepsilon_F$. Rysunek z publikacji [140].

stanu, potencjał chemiczny oraz parametr porządku Δ_0 w funkcji temperatury. Porównując je z wynikami Monte Carlo zauważamy zadowalającą zgodność, zarówno jakościową jak i ilościową, patrz rysunek 1.3. Otrzymana temperatura przejścia fazowego w tym podejściu wynosi $T_c^{(DMFT)} \simeq 0.16 \varepsilon_F$ i również dobrze się zgadza z wartością Monte Carlo $T_c \simeq 0.15 \varepsilon_F$. Głównym problemem tej metody jest fakt, że temperatura w której następuje odstępstwo od równania stanu (odpowiednio przesuniętego) dla nieoddziałującego gazu Fermiego pokrywa się dokładnie z temperaturą przejścia fazowego T_c , w przeciwieństwie do obliczeń Monte Carlo, zobacz dyskusja w podrozdziale 1.3.1 oraz rysunek 1.4. Kolejną wadą tej metody jest jej niepraktyczność w stosunku do układów bardziej złożonych, takich jak np. materia neutronowa (bardziej złożona struktura oddziaływania w sposób dramatyczny komplikuje postać efektywnego działania).

2.2.4 Metoda rozwinięcia ϵ

Metoda rozwinięcia ϵ jest przeznaczona do rozwiązywania problemu gazu zimnych atomów znajdujących się w granicy unitarnej. Opiera się ona na systematycznym rozwinięciu poszukiwanych wielkości fizycznych w funkcji wymiaru przestrzeni [141, 142, 143, 144, 145, 146]. Wykorzystuje się przy tym obserwację, że problem gazu atomów znajdujących się w granicy unitarnej staje się trywialny, jeśli rozważać go w przestrzeniach o wymiarach $d = 2$

i $d = 4$ [147]. Problem rozważany w przestrzeni o wymiarze $d = 4$ staje się równoważny problemowi nieoddziałującego gazu bozonów, natomiast problem rozważany w przestrzeni o wymiarze $d = 2$ staje się równoważny problemowi nieoddziałującego gazu fermionów.

Dokładna analiza problemu rozpraszania dwóch fermionów w przestrzeni o wymiarze $d = 4 - \epsilon$, gdzie stała sprzężenia jest wybrana w taki sposób aby odpowiadająca jej długość rozpraszania w przestrzeni $d = 3$ wynosiła nieskończoność, prowadzi do macierzy rozpraszania [141]:

$$iT(p_0, \mathbf{p}) = (ig)^2 iD(p_0, \mathbf{p}) + O(\epsilon^2), \quad (2.28)$$

gdzie:

$$g^2 = \frac{8\pi^2\epsilon}{m^2}, \quad D(p_0, \mathbf{p}) = \left(p_0 - \frac{p^2}{4m} + i\delta \right)^{-1}. \quad (2.29)$$

Funkcja $D(p_0, \mathbf{p})$ jest propagatorem cząstki swobodnej o masie $2m$, którą interpretuje się jako układ związany dwóch fermionów, czyli bozonowy stopień swobody. Zatem w przestrzeni o wymiarze $d = 4 - \epsilon$, gdzie $\epsilon \ll 1$, układ można traktować jako układ słabo oddziałujących bozonów. Dla przypadku tego można skonstruować rachunek perturbacyjny, wykorzystując jako małą wielkość stałą sprzężenia $g \propto \epsilon^{1/2}$.

Postępując podobnie dla wymiaru $d = 2 + \bar{\epsilon}$ otrzymujemy, że macierz rozpraszania przyjmuje postać:

$$iT(p_0, \mathbf{p}) = i\bar{g}^2 + O(\epsilon^2), \quad (2.30)$$

gdzie:

$$\bar{g}^2 = \frac{2\pi}{m}\bar{\epsilon}. \quad (2.31)$$

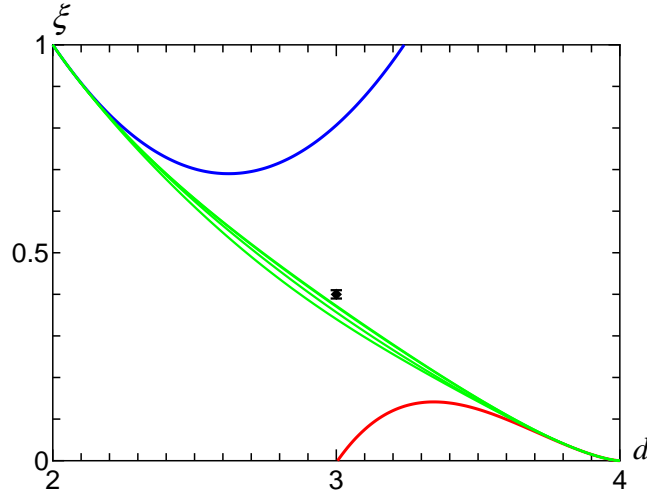
Macierz rozpraszania redukuje się do takiej samej postaci jaką otrzymujemy rozważając rozpraszanie dwóch fermionów na potencjale kontaktowym, ze stałą sprzężenia równą $\bar{g}^2 \propto \bar{\epsilon}^{1/2}$. Układ można zatem traktować w przestrzeni $d = 2 + \bar{\epsilon}$, gdzie $\bar{\epsilon} \ll 1$, jako układ słabo oddziałujących fermionów, dla którego również można skonstruować rachunek perturbacyjny.

Idea całego podejścia polega na znalezieniu rozwinięcia interesujących nas wielkości fizycznych w funkcji małego parametru ϵ lub $\bar{\epsilon}$, odpowiednio dla przestrzeni o wymiarze $d = 4 - \epsilon$ i $d = 2 + \bar{\epsilon}$. Następnie wykonuje się ekstrapolację do wymiaru przestrzeni $d = 3$ ($\epsilon = \bar{\epsilon} = 1$).

Dla energii stanu podstawowego $\xi = E/E_{fg}$ otrzymano następujące rozwinięcia [143, 146]:

$$\xi_{4-\epsilon} = \frac{\epsilon^{(6-\epsilon)/(4-\epsilon)}}{2} \left[1 - 0.04916\epsilon - 0.95961\epsilon^2 + O(\epsilon^3) \right], \quad (2.32)$$

$$\xi_{2+\bar{\epsilon}} = 1 - \bar{\epsilon} + 0.80685\bar{\epsilon}^2 + O(\bar{\epsilon}^3). \quad (2.33)$$



Rysunek 2.5: Zależność $\xi = E/E_{fg}$ w funkcji wymiaru przestrzeni, otrzymana za pomocą metody rozwinięcia ϵ . Niebieska i czerwona linia przedstawiają odpowiednio zależności $\xi_{2+\epsilon}$ i $\xi_{4-\epsilon}$. Za pomocą zielonych linii przedstawione są krzywe interpolujące, otrzymane metodą Padé. Czarny punkt przedstawia wynik otrzymany metodą Monte Carlo. Rysunek z publikacji [146].

Ważnym jest zauważenie, że $\xi_{4-1} \neq \xi_{2+1}$, zobacz rysunek 2.5. Z tego powodu aby otrzymać wynik dla $d = 3$ wykonuje się interpolację pomiędzy skrajnymi przypadkami, którą można wykonać na różne sposoby. Fakt ten stanowi główny zarzut stawiany pod adresem metody rozwinięcia ϵ . Interpolacja pomiędzy przypadkami $d = 2$ i $d = 4$, wykonana metodą Padé, daje dla wymiaru $d = 3$ wartość $\xi^{(\epsilon)} \simeq 0.36(2)$, co jest wartością niewiele mniejszą niż wartość otrzymana za pomocą metody Monte Carlo. Rysunek 2.5 przedstawia wartość ξ w funkcji wymiaru przestrzeni.

Formalizm opisanej metody można również uogólnić na przypadek temperatur skończonych [145]. W wyniku wykonanych obliczeń, otrzymano temperaturę przejścia fazowego równą $T_c^{(\epsilon)}/\epsilon_F = 0.18(1)$ co jest wielkością niewiele większą niż przewidywanie Monte Carlo. Podobnie jak poprzednie metody, podejście to również nie ujawnia istnienia drugiej charakterystycznej temperatury.

Podsumowując, przewidywania metody rozwinięcia ϵ dość dobrze zgadzają się z wynikami otrzymanymi metodą Monte Carlo. Z tego powodu metoda ta stanowi cenne narzędzie do badania zimnych gazów atomowych, gdyż jako jedyna z dostępnych metod dostarcza wyniki w formie analitycznej dla granicy unitarnej. Głównym problemem opisanej metody jest jej ograniczenie jedynie do badania układów znajdującego się w granicy unitarnej. Metoda ta nie nadaje się do badania układów będących poza granicą unitarną a tym bardziej do badania

bardziej złożonych układów np. rozrzedzonej materii neutronowej.

2.3 Podsumowanie

W poprzednim podrozdziale zostały opisane metody Monte Carlo, wykorzystywane do wyznaczania właściwości silnie skorelowanych układów fermionowych dla temperatury zera bezwzględnego. Zostały również przedstawione przybliżone metody, które jak się okazuje w większości przypadków, są w stanie z zadowalającą dokładnością odtworzyć wyniki Monte Carlo, otrzymane dla temperatury zera bezwzględnego. Jednakże, pomimo wielu sukcesów metod przybliżonych każda z nich napotyka problemy w przypadku obliczeń dla temperatur skończonych. Obliczenia dla temperatur większych od zera są szczególnie istotne, gdyż eksperymentalnie nigdy nie można schłodzić układu do temperatury zera bezwzględnego. Również samo zbadanie właściwości układu dla temperatur bliskich temperaturze przejścia fazowego stanowi niezwykle interesujący problem. W świetle przedstawionych powyżej wniosków należy stwierdzić, że aktualnie nie dysponujemy zadowalającą metodą przybliżoną, która w prosty sposób opisze właściwości silnie skorelowanych fermionów w temperaturach skończonych. Jediną metodą jaka jest w stanie pomóc nam w poznaniu właściwości termicznych tych niezwykle interesujących układów jest metoda kwantowego Monte Carlo, zdefiniowana dla temperatur skończonych. Dokładne zdefiniowanie formalizmu tej metody będzie stanowiło treść kolejnego rozdziału.

Rozdział 3

Metoda Kwantowego Monte Carlo dla temperatur skończonych

3.1 Gaz oddziałujących fermionów w skończonych temperaturach

3.1.1 Ogólne sformułowanie

Rozważmy układ oddziałujących fermionów o spinie 1/2, który opisywany jest za pomocą hamiltonianu:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{\lambda=\uparrow\downarrow} \int d^3\mathbf{r} \hat{\psi}_{\lambda}^{\dagger}(\mathbf{r}) \left(\frac{-\nabla^2}{2m} \right) \hat{\psi}_{\lambda}(\mathbf{r}) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\lambda,\lambda'=\uparrow\downarrow} \int d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' \hat{\psi}_{\lambda}^{\dagger}(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{\lambda'}^{\dagger}(\mathbf{r}') V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\psi}_{\lambda'}(\mathbf{r}') \hat{\psi}_{\lambda}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (3.1)$$

gdzie λ jest spinem cząstki a operatory pola spełniają relacje antykomutacyjne:

$$\{\hat{\psi}_{\lambda}^{\dagger}(\mathbf{r}), \hat{\psi}_{\lambda'}(\mathbf{r}')\} = \delta_{\lambda\lambda'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (3.2)$$

Oddziaływanie $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ jest jedynie funkcją względną odległości cząstek i nie zależy od ich spinów. W dalszej części rozdziału pokażemy, że oddziaływanie takie jest wystarczające aby poprawnie opisać właściwości rozrzedzonych gazów fermionów. Dokładna postać oddziaływania zostanie ustalona później, w zależności od rozważanego układu.

Interesuje nas wyznaczenie termodynamicznych właściwości układu cząstek, opisanego przez hamiltonian (3.1). W tym celu wykorzystamy wielki rozkład kanoniczny. Średnia po

wielkim zespole statystycznym, interesującej na obserwabli O wyraża się przez [29]:

$$O(\beta, \mu) = \frac{1}{Z(\beta, \mu)} \text{Tr} \left\{ \hat{O} \exp[-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})] \right\}, \quad (3.3)$$

$$Z(\beta, \mu) = \text{Tr} \left\{ \exp[-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})] \right\}, \quad (3.4)$$

gdzie Z jest wielką sumą statystyczną, $\beta = 1/T$ odwrotnością temperatury, μ potencjałem chemicznym układu określającym jego gęstość. Operator liczby cząstek \hat{N} wyraża się przez:

$$\hat{N} = \sum_{\lambda=\uparrow\downarrow} \int d^3\mathbf{r} \hat{\psi}_{\lambda}^{\dagger}(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{\lambda}(\mathbf{r}). \quad (3.5)$$

Ślad operatora obliczany jest dla zupełnego układu stanów w przestrzeni Focka. W celu uproszczenia problemu dokonajmy faktoryzacji Trottera, tj.:

$$\exp[-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})] = \prod_{k=1}^{N_{\tau}} \exp[-\Delta\tau(\hat{H} - \mu\hat{N})], \quad (3.6)$$

gdzie $\beta = N_{\tau}\Delta\tau$. Następnym krokiem jest dokonanie dekompozycji funkcji wykładniczej $e^{-\tau(\hat{H}-\mu\hat{N})}$ w taki sposób aby odseparować operatory jednociąłowe od operatorów dwuciąłowych. Znanych jest wiele sposobów wykonania takiej dekompozycji [148, 149, 150]. Ze względów praktycznych wybraliśmy rozwinięcie do drugiego rzędu w zmiennej $\Delta\tau$:

$$e^{-\Delta\tau(\hat{H}-\mu\hat{N})} = e^{-\frac{\Delta\tau}{2}\hat{K}} e^{-\Delta\tau\hat{V}} e^{-\frac{\Delta\tau}{2}\hat{K}} + \mathcal{O}(\Delta\tau^3), \quad (3.7)$$

gdzie $\hat{K} = \hat{T} - \mu\hat{N}$, \hat{T} jest operatorem energii kinetycznej, \hat{V} operatorem energii potencjalnej. Należy zauważyć, że chociaż samo rozwinięcie funkcji wykładniczej wykonano z dokładnością $\mathcal{O}(\Delta\tau^3)$ to podczas obliczania wielkiej sumy statystycznej Z dokładność ta redukuje się do rzędu $\mathcal{O}(\Delta\tau^2)$, tj.:

$$e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})} = e^{-\frac{\beta}{2}\hat{K}} \left(\prod_{k=1}^{N_{\tau}} e^{-\Delta\tau\hat{V}} e^{-\Delta\tau\hat{K}} \right) e^{+\frac{\beta}{2}\hat{K}} + \mathcal{O}(\Delta\tau^2). \quad (3.8)$$

Celem dalszych przekształceń jest zredukowanie problemu wielociąłowego do sumy problemów jednociąłowych. Aby osiągnąć ten cel należy wyrazić wszystkie występujące operatory w rozwinięciu (3.8) za pomocą operatorów jednociąłowych. Pokażemy, że operator $e^{-\Delta\tau\hat{K}}$ można wyrazić jako iloczyn operatorów jednociąłowych. Zapisując operatory pola w reprezentacji pędowej:

$$\hat{\psi}_{\lambda}(\mathbf{r}) = \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \hat{a}_{\lambda}(\mathbf{p}), \quad (3.9)$$

$$\hat{\psi}_{\lambda}^{\dagger}(\mathbf{r}) = \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \hat{a}_{\lambda}^{\dagger}(\mathbf{p}), \quad (3.10)$$

gdzie $\hat{a}_\lambda^\dagger(\mathbf{p})$ i $\hat{a}_\lambda(\mathbf{p})$ są odpowiednio operatorami kreacji i anihilacji, spełniającymi relacje antykomutacyjne:

$$\{\hat{a}_\lambda^\dagger(\mathbf{p}), \hat{a}_{\lambda'}(\mathbf{p}')\} = \delta_{\lambda\lambda'} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'), \quad (3.11)$$

operator \hat{K} przyjmuje postać:

$$\hat{K} = \sum_{\lambda=\uparrow\downarrow} \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \left(\frac{p^2}{2m} - \mu \right) \hat{n}_\lambda(\mathbf{p}). \quad (3.12)$$

W powyższym wzorze $\hat{n}_\lambda(\mathbf{p})$ jest operator liczby obsadzeń:

$$\hat{n}_\lambda(\mathbf{p}) = \hat{a}_\lambda^\dagger(\mathbf{p}) \hat{a}_\lambda(\mathbf{p}). \quad (3.13)$$

Operator ten posiada właściwości, które będą bardzo często wykorzystywane w dalszej części:

$$[\hat{n}_\lambda(\mathbf{p}), \hat{n}_{\lambda'}(\mathbf{p}')] = 0, \quad (3.14)$$

$$[\hat{n}_\lambda(\mathbf{p})]^2 = \hat{n}_\lambda(\mathbf{p}). \quad (3.15)$$

Aby pokazać, że $e^{-\Delta\tau\hat{K}}$ jest iloczynem operatorów jednociąłowych zauważmy, że dyskretyzując całkę po pędach operator ten możemy sprowadzić do postaci:

$$e^{-\Delta\tau\hat{K}} = \exp \left[\sum_{\mathbf{p},\lambda} \alpha(\mathbf{p}) \hat{n}_\lambda(\mathbf{p}) \right] = \prod_{\mathbf{p},\lambda} e^{\alpha(\mathbf{p}) \hat{n}_\lambda(\mathbf{p})}, \quad (3.16)$$

gdzie $\alpha(\mathbf{p}) = -\frac{\Delta\tau}{L^3} \left(\frac{p^2}{2m} - \mu \right)$ oraz L^3 jest objętością pudła, w którym następuje dyskretyzacja pędów. Zatem wystarczy pokazać, że operator $e^{\alpha(\mathbf{p}) \hat{n}_\lambda(\mathbf{p})}$ jest operatorem jednociąłowym.

Rozwijając go w szereg Taylora oraz wykorzystując (3.15) otrzymujemy:

$$\begin{aligned} e^{\alpha(\mathbf{p}) \hat{n}_\lambda(\mathbf{p})} &= 1 + \left(\sum_{m=1}^{\infty} \frac{\alpha^m(\mathbf{p})}{m!} \right) \hat{n}_\lambda(\mathbf{p}) \\ &= 1 + (e^{\alpha(\mathbf{p})} - 1) \hat{n}_\lambda(\mathbf{p}). \end{aligned} \quad (3.17)$$

Jednociąłowy charakter tego operatora staje się oczywisty.

Cała złożoność rozważanego problemu wynika z wielociąłowego charakteru operatora $e^{-\Delta\tau\hat{V}}$. Chwilowo założymy, że istnieje przekształcenie całkowe, które transformuje operator wielociąłowy w iloczyn operatorów jednociąłowych. Załóżmy, że przekształcenie ma postać:

$$e^{-\Delta\tau\hat{V}} = \int d\sigma e^{-\Delta\tau\hat{w}(\sigma)}, \quad (3.18)$$

gdzie \hat{w} jest operatorem jednociąłowym, wyrażającym się przez operatory liczby obsadzeń. Redukcja problemu wielociąłowego do sumy (całki) problemów jednociąłowych następuje

kosztem wprowadzenia dodatkowego stopnia swobody σ , po którym musimy dokonać całkowania. Przyjęto zwyczajowo nazywać dodatkowy stopień swobody σ *polem pomocniczym*. W ogólności σ jest zmienną wielowymiarową. Równanie (3.18) przedstawia idee tzw. *transformacji Hubbarda-Stratonovicha* (HS) [151, 152]. Chociaż, dla danego \hat{V} można skonstruować kilka transformacji HS [153], to nie każda jej postać może zostać wykorzystana w praktycznych obliczeniach. Znalezienie odpowiedniej transformacji (dla praktycznych zastosowań) stanowi najtrudniejszy element całej metody. Ponieważ transformacja Hubbarda-Stratonovicha jest sercem metody prezentowanej w tym rozdziale, zostanie ona dokładnie opisana w osobnej części. Dla przejrzystości dalszych rozważań zdefiniujmy operatory:

$$\hat{W}(\sigma) = e^{-\frac{4\tau}{2}\hat{K}} e^{-4\tau\hat{w}(\sigma)} e^{-\frac{4\tau}{2}\hat{K}}, \quad (3.19)$$

$$\hat{U}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_{N_\tau}) \equiv \hat{U}(\{\sigma\}) = \prod_{k=1}^{N_\tau} \hat{W}(\sigma_k). \quad (3.20)$$

Na podstawie powyższych definicji oraz wykorzystując wzór (3.7), operator \hat{U} może zostać przedstawiony w zwartej postaci jako:

$$\hat{U}(\{\sigma\}) \stackrel{N_\tau \rightarrow \infty}{\equiv} \mathcal{T}_\tau e^{-\int_0^\beta d\tau [\hat{h}(\{\sigma\}) - \mu \hat{N}]}, \quad (3.21)$$

gdzie \mathcal{T}_τ oznacza iloczyn chronologiczny operatorów w czasie urojonym. $\hat{h}(\{\sigma\})$ jest wynikowym hamiltonianem jednociąłowym zależnym od σ . Ostatni wzór ujawnia bardzo bliski związek prezentowanej metody z podejściem feynmanowskim, *całek po trajektoriach w czasie urojonym* [154].

Ostatecznie wielką sumę statystyczną można zapisać w zwartej formie:

$$Z(\beta, \mu) = \int \mathcal{D}\sigma \text{Tr} \hat{U}(\{\sigma\}), \quad (3.22)$$

W powyższym zapisie symbol $\int \mathcal{D}\sigma$ oznacza wykonanie wielowymiarowego całkowania, tj. $\int d\sigma_1 d\sigma_2 \dots d\sigma_{N_\tau}$. Wyrażenie (3.22) ma dwie ważne cechy. Po pierwsze, problem obliczania wielkiej sumy statystycznej został sprowadzony do problemu obliczania całki. Po drugie, ponieważ operator \hat{U} można zapisać jako iloczyn operatorów jednociąłowych, to wyznaczenie śladu sprowadza się do algebry macierzy o stosunkowo małych wymiarach.

Ślad operatora jednociąłowego \hat{U} obliczamy dla pełnego układu stanów w przestrzeni Focka zauważając, że wybierając odpowiednią bazę jednocząstkową $\{\varphi_\mu\}$, operator \hat{U} można zapisać w diagonalnej postaci (patrz wzór (3.21)):

$$\hat{U} = \exp \left[\sum_{\mu} G_{\mu\mu} \hat{n}_{\mu} \right] = \prod_{\mu} \exp [G_{\mu\mu} \hat{n}_{\mu}], \quad (3.23)$$

gdzie $\hat{n}_\mu = \hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\mu$ jest operatorem liczby obsadzeń stanu jednocząstkowego φ_μ . W bazie tej ślad operatora przybiera postać:

$$\text{Tr } \hat{\mathcal{U}} = \sum_{\{n_\nu\}} \langle \{n_\nu\} | \prod_{\mu} \exp [G_{\mu\mu} \hat{n}_\mu] | \{n_\nu\} \rangle \quad (3.24)$$

$$\begin{aligned} &= \prod_{\mu} [1 + e^{G_{\mu\mu}}] = \prod_{\mu} [1 + \mathcal{U}_{\mu\mu}] \\ &= \det(1 + \mathcal{U}) \end{aligned} \quad (3.25)$$

gdzie ślad po całej fermionowej przestrzeni Focka rozumiany jest jako:

$$\sum_{\{n_\nu\}} = \sum_{n_1=0,1} \sum_{n_2=0,1} \dots \sum_{n_\infty=0,1} . \quad (3.26)$$

\mathcal{U} jest macierzową reprezentacją operatora $\hat{\mathcal{U}}$ w jednocząstkowej przestrzeni Hilberta. Końcowy wzór (3.25) jest poprawny dla dowolnego wyboru bazy jednocząstkowej $\{\varphi_\mu\}$ [151, 152].

Postępując podobnie jak dla wielkiej sumy statystycznej Z , otrzymujemy wyrażenie na wartość oczekiwaną operatora \hat{O} o postaci:

$$O(\beta, \mu) = \int \mathcal{D}\sigma \frac{\text{Tr } \hat{\mathcal{U}}(\{\sigma\}) \text{Tr } \hat{O} \hat{\mathcal{U}}(\{\sigma\})}{Z(\beta, \mu) \text{Tr } \hat{\mathcal{U}}(\{\sigma\})}. \quad (3.27)$$

Dodatkowy czynnik $\text{Tr } \hat{\mathcal{U}}$ został wprowadzony ze względów praktycznych. Aby w praktyce wykorzystać wzór (3.27) musimy umieć wydajnie obliczać całki wielowymiarowe, co w ogólności jest zadaniem bardzo trudnym. Jeśli jednak $\text{Tr } \hat{\mathcal{U}}(\{\sigma\})$ jest wielkością rzeczywistą oraz nieujemną dla całej dziedziny całkowania to wielkość:

$$P(\{\sigma\}) = \frac{\text{Tr } \hat{\mathcal{U}}(\{\sigma\})}{Z(\beta, \mu)} \quad (3.28)$$

można traktować jako gęstość prawdopodobieństwa oraz całkę wielowymiarową $\int \mathcal{D}\sigma$ można obliczyć numerycznie, wykorzystując metodę Monte Carlo z próbkowaniem ważonym (ang. *importance sampling*) [151, 152, 155, 156]. Do generacji próby z rozkładu $P(\{\sigma\})$ można wykorzystać algorytm Metropolis [157]. Szczegóły wykorzystanego algorytmu całkowania Monte Carlo zostaną podane w kolejnym rozdziale.

Sytuacja, gdy $P(\{\sigma\})$ nie jest wielkością nieujemną dla całej dziedziny całkowania znana jest jako *fermionowy problem znaku*. Problem ten dotyczy głównie układów fermionowych a jego źródłem jest antysymetryczność funkcji falowej opisującej układ fermionów [158].

Problem znaku można wyeliminować wprowadzając dodatkowe ograniczenie na postać transformacji HS. Załóżmy, że można ją zapisać w postaci:

$$e^{-A\tau\hat{V}} = \int d\sigma e^{-A\tau\hat{w}_\uparrow(\sigma)} e^{-A\tau\hat{w}_\downarrow(\sigma)}, \quad (3.29)$$

gdzie \hat{w}_λ jest operatorem jednociąłowym, który działa tylko na stany o spinie λ . Wtedy również operator $\hat{\mathcal{U}}$ można zapisać jako:

$$\hat{\mathcal{U}}(\{\sigma\}) = \hat{\mathcal{U}}_\uparrow(\{\sigma\})\hat{\mathcal{U}}_\downarrow(\{\sigma\}). \quad (3.30)$$

co w konsekwencji prowadzi do:

$$\text{Tr } \hat{\mathcal{U}}(\{\sigma\}) = \det[1 + \mathcal{U}(\{\sigma\})] = \det[1 + \mathcal{U}_\uparrow(\{\sigma\})] \det[1 + \mathcal{U}_\downarrow(\{\sigma\})]. \quad (3.31)$$

Ponieważ zakładamy, że potencjał chemiczny jest taki sam dla cząstek o różnym spinie, co fizycznie odpowiada układowi niespolaryzowanemu, reprezentacje macierzowe \mathcal{U}_\uparrow i \mathcal{U}_\downarrow są dokładnie takie same oraz:

$$\text{Tr } \hat{\mathcal{U}}(\{\sigma\}) = \det[1 + \mathcal{U}_\uparrow(\{\sigma\})]^2 = \det[1 + \mathcal{U}_\downarrow(\{\sigma\})]^2 \geq 0. \quad (3.32)$$

Zatem w przypadku, gdy transformację HS można zapisać w postaci dwóch operatorów działających odpowiednio na cząstki o spinie \uparrow i \downarrow wyrażenie (3.28) jest wielkością nieujemną i można ją traktować jako gęstość prawdopodobieństwa¹. Z tego powodu w rozprawie będziemy rozważali jedynie transformacje HS, które można zapisać w postaci (3.29).

3.1.2 Wartość oczekiwana operatora jednociąłowego

Rozważmy dowolny operator jednociąłowy:

$$\hat{\mathcal{O}}^{(1B)} = \sum_{\lambda, \lambda' = \uparrow \downarrow} \int d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' \hat{\psi}_\lambda^\dagger(\mathbf{r}) O_{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \hat{\psi}_{\lambda'}(\mathbf{r}'). \quad (3.33)$$

Na podstawie wzorów (3.25) - (3.28) wartość oczekiwana tego operatora przyjmuje postać:

$$\langle \hat{\mathcal{O}}^{(1B)} \rangle = \int \mathcal{D}\sigma P(\{\sigma\}) \sum_{\lambda, \lambda' = \uparrow \downarrow} \int d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' O_{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\text{Tr} [\hat{\psi}_\lambda^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{\lambda'}(\mathbf{r}') \hat{\mathcal{U}}(\{\sigma\})]}{\det[1 + \mathcal{U}(\{\sigma\})]}. \quad (3.34)$$

Aby obliczyć ślad $\text{Tr} [\hat{\psi}_\lambda^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{\lambda'}(\mathbf{r}') \hat{\mathcal{U}}]$ wygodnie jest wybrać bazę jednocząstkową, w której operator $\hat{\mathcal{U}}$ jest diagonalny. Dodatkowo pamiętamy, że operator $\hat{\mathcal{U}}$ można zapisać w postaci $\hat{\mathcal{U}} = \hat{\mathcal{U}}_\uparrow \hat{\mathcal{U}}_\downarrow$. Fizycznie oznacza to, że baza funkcji jednocząstkowych $\{\varphi_{\lambda\mu}\}$ diagonalizująca $\hat{\mathcal{U}}$ ma dobrze określony spin λ . Wyrażając operatory pola w nowej bazie ($\varphi_{\lambda\mu}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \lambda\mu \rangle$):

$$\hat{\psi}_\lambda(\mathbf{r}) = \sum_{\mu} \varphi_{\lambda\mu}^*(\mathbf{r}) \hat{a}_{\lambda\mu}, \quad (3.35)$$

$$\hat{\psi}_\lambda^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_{\mu} \varphi_{\lambda\mu}(\mathbf{r}) \hat{a}_{\lambda\mu}^\dagger, \quad (3.36)$$

¹Można pokazać, że warunkiem wystarczającym na to aby $\text{Tr } \hat{\mathcal{U}}(\{\sigma\}) \geq 0$ jest niezmienniczość operatora $\hat{\mathcal{U}}(\{\sigma\})$ ze względu na przekształcenie odwrócenia w czasie [151].

otrzymujemy:

$$\text{Tr} \left[\hat{\psi}_\lambda^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{\lambda'}(\mathbf{r}') \hat{\mathcal{U}} \right] = \sum_{\mu\nu} \varphi_{\lambda\mu}(\mathbf{r}) \varphi_{\lambda'\nu}^*(\mathbf{r}') \text{Tr} \left[\hat{a}_{\lambda\mu}^\dagger \hat{a}_{\lambda'\nu} \hat{\mathcal{U}} \right]. \quad (3.37)$$

Ślad $\text{Tr} \left[\hat{a}_{\lambda\mu}^\dagger \hat{a}_{\lambda'\nu} \hat{\mathcal{U}} \right]$ obliczamy podobnie jak we wzorze (3.24). Wynik końcowy ma postać:

$$\text{Tr} \left[\hat{a}_{\lambda\mu}^\dagger \hat{a}_{\lambda'\nu} \hat{\mathcal{U}} \right] = \delta_{\lambda\lambda'} \det(1 + \mathcal{U}) \left[\frac{\mathcal{U}_\lambda}{1 + \mathcal{U}_\lambda} \right]_{\mu\nu}. \quad (3.38)$$

Zatem, ogólny wzór dla wartości oczekiwanej operatora jednociąłowego przybiera postać:

$$\langle \hat{O}^{(1B)} \rangle = \int \mathcal{D}\sigma P(\{\sigma\}) \sum_{\lambda=\uparrow\downarrow} \int d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' O_{\lambda\lambda}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') n_\lambda(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \{\sigma\}), \quad (3.39)$$

gdzie:

$$n_\lambda(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \{\sigma\}) = \sum_{\mu\nu} \varphi_{\lambda\mu}(\mathbf{r}) \left[\frac{\mathcal{U}_\lambda(\{\sigma\})}{1 + \mathcal{U}_\lambda(\{\sigma\})} \right]_{\mu\nu} \varphi_{\lambda\nu}^*(\mathbf{r}'), \quad (3.40)$$

jest położeniową reprezentacją jednociąłowej macierzy gęstości (co zostanie pokazane w dalszej części rozdziału). Wzór (3.39) jest prawdziwy dla dowolnego wyboru bazy jednocząstkowej $\{\varphi_{\lambda\mu}\}$.

Jako przykład zastosowania otrzymanego wzoru (3.39), rozważmy operator energii kinetycznej \hat{T} . W tym przypadku jako bazę jednocząstkową wygodnie jest wybrać bazę fal płaskich:

$$\varphi_{\lambda\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \eta_\lambda e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}, \quad (3.41)$$

gdzie η_λ jest spinorem, V objętością pudła, w którym następuje normowanie funkcji falowych. Ponieważ elementy macierzowe operatora energii kinetycznej spełniają relację:

$$\int d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' \varphi_{\lambda\mathbf{p}}(\mathbf{r}) T_{\lambda\lambda}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \varphi_{\lambda\mathbf{p}'}^*(\mathbf{r}') = \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \frac{p^2}{2m}, \quad (3.42)$$

wartość oczekiwana tego operatora wyraża się przez:

$$\langle \hat{T} \rangle = \int \mathcal{D}\sigma P(\{\sigma\}) \sum_{\lambda=\uparrow\downarrow} \sum_{\mathbf{p}} \frac{p^2}{2m} \left[\frac{\mathcal{U}_\lambda(\{\sigma\})}{1 + \mathcal{U}_\lambda(\{\sigma\})} \right]_{\mathbf{p}\mathbf{p}}. \quad (3.43)$$

Oczywiste zatem jest, że pędowa reprezentacja jednociąłowej macierzy gęstości wyraża się przez:

$$n_\lambda(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \{\sigma\}) = \left[\frac{\mathcal{U}_\lambda(\{\sigma\})}{1 + \mathcal{U}_\lambda(\{\sigma\})} \right]_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}. \quad (3.44)$$

W przypadku nieoddziałującego gazu Fermiego jest ona macierzą diagonalną z wartościami na diagonalu równymi prawdopodobieństwu obsadzenia stanu $f(\mathbf{p}) = 1/(\exp[\beta(\frac{p^2}{2m} - \mu)] + 1)$.

3.1.3 Wartość oczekiwana operatora dwuciałowego

Rozważmy dowolny operator dwuciałowy:

$$\hat{O}^{(2B)} = \sum_{\lambda_1, \lambda_2, \lambda'_1, \lambda'_2 = \uparrow \downarrow} \int d^3 \mathbf{r}_1 d^3 \mathbf{r}_2 d^3 \mathbf{r}'_1 d^3 \mathbf{r}'_2 \hat{\psi}_{\lambda_1}^\dagger(\mathbf{r}_1) \hat{\psi}_{\lambda_2}^\dagger(\mathbf{r}_2) \times \\ \times O_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda'_1 \lambda'_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2) \hat{\psi}_{\lambda'_2}(\mathbf{r}'_2) \hat{\psi}_{\lambda'_1}(\mathbf{r}'_1). \quad (3.45)$$

Problem obliczania wartości oczekiwanej operatora dwuciałowego można sprowadzić do problemu obliczania wartości oczekiwanych operatorów jednociiałowych wykorzystując twierdzenie Wicka [29]:

$$\langle \hat{\psi}_{\lambda_1}^\dagger(\mathbf{r}_1) \hat{\psi}_{\lambda_2}^\dagger(\mathbf{r}_2) \hat{\psi}_{\lambda'_2}(\mathbf{r}'_2) \hat{\psi}_{\lambda'_1}(\mathbf{r}'_1) \rangle = \langle \hat{\psi}_{\lambda_1}^\dagger(\mathbf{r}_1) \hat{\psi}_{\lambda'_1}(\mathbf{r}'_1) \rangle \langle \hat{\psi}_{\lambda_2}^\dagger(\mathbf{r}_2) \hat{\psi}_{\lambda'_2}(\mathbf{r}'_2) \rangle \\ - \langle \hat{\psi}_{\lambda_1}^\dagger(\mathbf{r}_1) \hat{\psi}_{\lambda'_2}(\mathbf{r}'_2) \rangle \langle \hat{\psi}_{\lambda_2}^\dagger(\mathbf{r}_2) \hat{\psi}_{\lambda'_1}(\mathbf{r}'_1) \rangle. \quad (3.46)$$

W związku z tym wartość oczekiwana operatora dwuciałowego przybiera postać:

$$\langle \hat{O}^{(2B)} \rangle = \int \mathcal{D}\sigma P(\{\sigma\}) \sum_{\lambda, \lambda' = \uparrow \downarrow} \int d^3 \mathbf{r}_1 d^3 \mathbf{r}_2 d^3 \mathbf{r}'_1 d^3 \mathbf{r}'_2 \times \\ \times [O_{\lambda \lambda' \lambda \lambda'}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2) n_\lambda(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1, \{\sigma\}) n_{\lambda'}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_2, \{\sigma\}) \\ - O_{\lambda \lambda' \lambda' \lambda}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2) n_\lambda(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_2, \{\sigma\}) n_{\lambda'}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_1, \{\sigma\})], \quad (3.47)$$

gdzie $n_\lambda(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \{\sigma\})$ dane jest wzorem (3.40).

Dobrym przykładem wykorzystania wzoru (3.47) jest wyznaczenie wartości oczekiwanej operatora energii potencjalnej:

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{\lambda, \lambda' = \uparrow \downarrow} \int d^3 \mathbf{r} d^3 \mathbf{r}' \hat{\psi}_\lambda^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{\lambda'}^\dagger(\mathbf{r}') V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\psi}_{\lambda'}(\mathbf{r}') \hat{\psi}_\lambda(\mathbf{r}). \quad (3.48)$$

Łatwo zauważyć, że przybiera on postać zgodną ze wzorem (3.45) jeśli elementy macierzowe zdefiniujemy jako:

$$O_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda'_1 \lambda'_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2) = \frac{1}{2} \delta_{\lambda_1 \lambda'_1} \delta_{\lambda_2 \lambda'_2} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_2) V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \quad (3.49)$$

Wartość oczekiwana przyjmuje postać:

$$\langle \hat{V} \rangle = \frac{1}{2} \int \mathcal{D}\sigma P(\{\sigma\}) \int d^3 \mathbf{r}_1 d^3 \mathbf{r}_2 V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \times \\ \times \left[\sum_{\lambda, \lambda' = \uparrow \downarrow} n_\lambda(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1, \{\sigma\}) n_{\lambda'}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_2, \{\sigma\}) - \sum_{\lambda = \uparrow \downarrow} n_\lambda(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \{\sigma\}) n_\lambda(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, \{\sigma\}) \right]. \quad (3.50)$$

3.1.4 Obliczanie temperaturowej funkcji Greena

Temperaturowa funkcja Greena w czasie urojonym jest kolejną wielkością, którą można dokładnie obliczyć za pomocą metody Kwantowego Monte Carlo. Funkcja ta zdefiniowana jest następująco [29, 159]:

$$\mathcal{G}(\alpha\tau, \alpha'\tau') = -\frac{1}{Z} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta\hat{K}} \mathcal{T}_\tau [\hat{a}_\alpha(\tau) \hat{a}_{\alpha'}^\dagger(\tau')] \right\}, \quad \tau - \tau' \in (-\beta, \beta), \quad (3.51)$$

gdzie:

$$\hat{a}_\alpha(\tau) = e^{\tau\hat{K}} \hat{a}_\alpha e^{-\tau\hat{K}}, \quad (3.52)$$

$$\hat{a}_\alpha^\dagger(\tau) = e^{\tau\hat{K}} \hat{a}_\alpha^\dagger e^{-\tau\hat{K}}, \quad (3.53)$$

oraz α jest dowolnym stanem z przestrzeni Hilberta. Ponieważ rozważamy przypadki dla których hamiltonian nie zależy jawnie od czasu, temperaturowa funkcja Greena będzie tylko funkcją różnicy $\Delta\tau = \tau - \tau'$:

$$\mathcal{G}_{\alpha\alpha'}(\Delta\tau) = \begin{cases} -\frac{1}{Z} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta\hat{K}} \hat{a}_\alpha(\Delta\tau) \hat{a}_{\alpha'}^\dagger(0) \right\} & \Delta\tau > 0, \\ +\frac{1}{Z} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta\hat{K}} \hat{a}_{\alpha'}^\dagger(0) \hat{a}_\alpha(\Delta\tau) \right\} & \Delta\tau < 0. \end{cases} \quad (3.54)$$

W praktycznych zastosowaniach będziemy wykorzystywali tylko przypadek, gdy $\tau < \tau'$, zatem dalsze obliczenia ograniczymy do sytuacji $\Delta\tau < 0$:

$$\mathcal{G}_{\alpha\alpha'}^<(\Delta\tau) = \frac{1}{Z} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta\hat{K}} \hat{a}_{\alpha'}^\dagger(0) \hat{a}_\alpha(\Delta\tau) \right\}. \quad (3.55)$$

Wzór ten można również zapisać w równoważnej formie:

$$\mathcal{G}_{\alpha\alpha'}^<(\tau) = \frac{1}{Z} \text{Tr} \left\{ e^{-(\beta-\tau)\hat{K}} \hat{a}_{\alpha'}^\dagger e^{-\tau\hat{K}} \hat{a}_\alpha \right\}, \quad (3.56)$$

gdzie teraz $\tau = -\Delta\tau \in (0, \beta)$. Na podstawie wzoru (3.27) otrzymujemy:

$$\mathcal{G}_{\alpha\alpha'}^<(\tau) = \int \mathcal{D}\sigma P(\{\sigma\}) \frac{\text{Tr} \left[\hat{\mathcal{U}}(0, \beta - \tau, \{\sigma\}) \hat{a}_{\alpha'}^\dagger \hat{\mathcal{U}}(\beta - \tau, \beta, \{\sigma\}) \hat{a}_\alpha \right]}{\det[1 + \mathcal{U}(\{\sigma\})]}, \quad (3.57)$$

gdzie:

$$\hat{\mathcal{U}}(\alpha, \beta, \{\sigma\}) = \prod_{k=N_\alpha+1}^{N_\beta} \hat{\mathcal{W}}(\sigma_k), \quad N_\alpha\tau = \alpha, \quad N_\beta\tau = \beta. \quad (3.58)$$

Aby obliczyć ślad $\text{Tr} \left[\hat{\mathcal{U}}(0, \beta - \tau, \{\sigma\}) \hat{a}_{\alpha'}^\dagger \hat{\mathcal{U}}(\beta - \tau, \beta, \{\sigma\}) \hat{a}_\alpha \right]$ dokonamy zamiany miejscami operatorów \hat{a}_α^\dagger i $\hat{\mathcal{U}}$. W tym celu założymy, że operator $\hat{\mathcal{U}}$ w bazie jednocząstkowej $\{\varphi_\alpha\}$ można zapisać jako:

$$\hat{\mathcal{U}} = e^{-\hat{G}} = e^{-\sum_{\rho\sigma} G_{\rho\sigma} \hat{a}_\rho^\dagger \hat{a}_\sigma}. \quad (3.59)$$

Możemy zatem napisać:

$$\hat{a}_\alpha^\dagger \hat{\mathcal{U}} = \hat{\mathcal{U}} e^{\hat{G}} \hat{a}_\alpha^\dagger e^{-\hat{G}}. \quad (3.60)$$

Operator $e^{\hat{G}} \hat{a}_\alpha^\dagger e^{-\hat{G}}$ przekształcamy wykorzystując znaną relację operatorową:

$$e^{\hat{A}} \hat{B} e^{-\hat{A}} = \hat{B} + \frac{1}{1!} [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \dots \quad (3.61)$$

W wyniku bezpośrednich rachunków otrzymujemy wynik:

$$e^{\hat{G}} \hat{a}_\alpha^\dagger e^{-\hat{G}} = \sum_\rho (e^{\hat{G}})_{\rho\alpha} \hat{a}_\rho^\dagger = \sum_\rho \mathcal{U}_{\rho\alpha}^{-1} \hat{a}_\rho^\dagger. \quad (3.62)$$

Ślad zatem przybiera postać:

$$\text{Tr} \left[\hat{\mathcal{U}}(0, \beta - \tau) \hat{a}_{\alpha'}^\dagger \hat{\mathcal{U}}(\beta - \tau, \beta) \hat{a}_\alpha \right] = \sum_\rho \mathcal{U}^{-1}(\beta - \tau, \beta)_{\rho\alpha'} \text{Tr} \left[\hat{\mathcal{U}} \hat{a}_\rho^\dagger \hat{a}_\alpha \right]. \quad (3.63)$$

Dalsze obliczenia przeprowadzamy podobnie jak dla wartości oczekiwanej operatora jedno-ciałowego. Wykorzystując wzór (3.38) otrzymujemy:

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{\alpha\alpha'}^<(\tau) &= \int \mathcal{D}\sigma P(\{\sigma\}) \sum_\rho \mathcal{U}^{-1}(\beta - \tau, \beta, \{\sigma\})_{\rho\alpha'} \left[\frac{\mathcal{U}(\{\sigma\})}{1 + \mathcal{U}(\{\sigma\})} \right]_{\rho\alpha} \\ &= \int \mathcal{D}\sigma P(\{\sigma\}) \left[\left(\mathcal{U}^{-1}(\beta - \tau, \beta, \{\sigma\}) \right)^T \frac{\mathcal{U}(\{\sigma\})}{1 + \mathcal{U}(\{\sigma\})} \right]_{\alpha'\alpha}. \end{aligned} \quad (3.64)$$

Szczególnie często wykorzystywana jest temperaturowa funkcja Greena zapisana w reprezentacji położeniowej tzn. $\{\alpha\} \rightarrow \{\mathbf{r}, \lambda\}$. Dla tego przypadku otrzymujemy wyrażenie:

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{\lambda\lambda'}^<(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau) &= \delta_{\lambda\lambda'} \int \mathcal{D}\sigma P(\{\sigma\}) \sum_{\mu\nu} \varphi_{\lambda\mu}(\mathbf{r}) \varphi_{\lambda'\nu}^*(\mathbf{r}') \times \\ &\quad \times \left[\left(\mathcal{U}_\lambda^{-1}(\beta - \tau, \beta, \{\sigma\}) \right)^T \frac{\mathcal{U}_\lambda(\{\sigma\})}{1 + \mathcal{U}_\lambda(\{\sigma\})} \right]_{\mu\nu}, \end{aligned} \quad (3.65)$$

gdzie dodatkowo operator \mathcal{U} przetransformowano do dowolnej bazy jednocząstkowej $\{\varphi_{\lambda\mu}\}$.

3.2 Wybór bazy jednocząstkowej

W poprzednim podrozdziale pokazaliśmy w jaki sposób problem wielociałowy można sprowadzić do sumy problemów jedno-ciałowych. Aby w praktyce zastosować przedstawiony formalizm należy dokonać wyboru dogodnej bazy jednocząstkowej. W tym celu zauważmy, że

rozważany hamiltonian dany wzorem (3.1) można zapisać w postaci:

$$\hat{H} = \sum_{\lambda=\uparrow\downarrow} \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{p^2}{2m} \hat{n}_{\lambda}(\mathbf{p}) - \frac{1}{2} \sum_{\lambda=\uparrow\downarrow} \int d^3\mathbf{r} V(\mathbf{r}) \hat{n}_{\lambda}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \sum_{\lambda,\lambda'=\uparrow\downarrow} \int d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{n}_{\lambda}(\mathbf{r}) \hat{n}_{\lambda'}(\mathbf{r}'), \quad (3.66)$$

gdzie $\hat{n}_{\lambda}(\mathbf{p})$ i $\hat{n}_{\lambda}(\mathbf{r})$ są odpowiednio operatorami liczby obsadzeń cząstek w przestrzeni pędów i położeń. Ponieważ hamiltonian układu składa się jedynie z operatorów $\hat{n}_{\lambda}(\mathbf{p})$ i $\hat{n}_{\lambda}(\mathbf{r})$ w celu wykonania praktycznych obliczeń jako bazę jednocząstkową wygodnie jest wybrać funkcje własne operatora pędu $\hat{\mathbf{p}}$ lub operatora położenia $\hat{\mathbf{r}}$.

Rozważmy bazę funkcji własnych operatora położenia. Baza ta składa się z funkcji $\varphi_{\mathbf{r}_i}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$. Funkcja własna $\varphi_{\mathbf{r}_i}$ reprezentuje cząstkę zlokalizowaną w punkcie \mathbf{r}_i . Ze względów praktycznych rozważany układ fermionów umieszczamy w pudle o objętości $V = L^3$ (L jest długością pudła) z okresyjnymi warunkami brzegowymi, oraz wybieramy tylko pewien podzbiór funkcji własnych $\{\varphi_{\mathbf{r}_i}\}$ takich, że $\mathbf{r}_i = \mathbf{i}l$, gdzie $\mathbf{i} = (i_x, i_y, i_z)$, $i_x, i_y, i_z = 1, \dots, N_s$ oraz $N_s l = L$. Taki wybór bazy jednocząstkowej jest bardzo popularny w fizyce. W literaturze określany jest mianem *obliczeń na sieci*. Sieć zdefiniowana jest przez dwa parametry: l zwany stałą sieci i N_s zwany rozmiarem sieci. Punkty \mathbf{i} będziemy nazywali węzłami sieci.

Transformacja Furiera funkcji bazowych $\{\varphi_{\mathbf{r}_i}\}$ daje zbiór funkcji własnych operatora pędu:

$$\varphi_{\mathbf{p}_k}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{p}_k \cdot \mathbf{r}}, \quad (3.67)$$

gdzie $\mathbf{p}_k = \frac{2\pi}{L} \mathbf{k}$, $k_x, k_y, k_z = 0, \pm 1, \dots, \pm(N_s - 1)/2, N_s/2$. Funkcje $\{\varphi_{\mathbf{p}_k}\}$ tworzą tzw. *sieć odwrotną*. Zauważmy, że maksymalna wartość pędu wynosi π/l . Poprzez podobieństwo do fizyki ciała stałego mówimy, że sieć odwrotna ograniczona jest do *pierwszej strefy Brillouina*.

W dalszej części opisujemy dokładniej formalizm obliczeń na sieci, oraz rozważymy jaki wpływ na dokładność obliczeń ma wyżej opisany wybór bazy jednocząstkowej. W tym celu wprowadzimy formalizm reprezentacji zmiennej dyskretnej DVR (ang. *Discrete Variable Representation*) [160, 161].

Niech $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$ będzie przestrzenią Hilberta naszego problemu, tj. przestrzenią funkcji całkowalnych z kwadratem na przestrzeni \mathbb{R}^3 . Niech P będzie operatorem rzutowym przestrzeni \mathcal{H} na podprzestrzeń \mathcal{S} rozpiętą przez zbiór wybranych funkcji $\{\varphi_{\mathbf{r}_i}\}$ tj. $\mathcal{S} = P\mathcal{H}$. Mając dany zbiór N_s^3 punktów przestrzeni \mathbb{R}^3 : $\{\mathbf{r}_i : i_x, i_y, i_z = 1, \dots, N_s\}$ możemy zdefiniować wyrzutowane funkcje: $\Delta_i(\mathbf{r}) = P[\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)]$. W notacji Diraca otrzymujemy $|\Delta_i\rangle = P|\mathbf{r}_i\rangle$ lub $\Delta_i(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \Delta_i \rangle$.

Wykorzystując własności operatora rzutowego, tj. $P^\dagger P = P^2 = P$, łatwo można pokazać, że:

$$\langle \Delta_i | \Delta_j \rangle = \Delta_j(\mathbf{r}_i) = \Delta_i^*(\mathbf{r}_j). \quad (3.68)$$

Relacja (3.68) jest spełniona wtedy i tylko wtedy gdy funkcja Δ_i nie znika tylko w punkcie \mathbf{r}_i . W konsekwencji wyrzutowany zbiór funkcji $\{\Delta_i(\mathbf{r}) : i_x, i_y, i_z = 1, \dots, N_s\}$ tworzy zbiór funkcji ortogonalnych oraz:

$$\Delta_i(\mathbf{r}_j) = K_i \delta_{ij}, \quad (3.69)$$

gdzie $K_i = \langle \Delta_i | \Delta_i \rangle$. Dzięki temu możemy wprowadzić ortonormalną wersję funkcji $\Delta_i(\mathbf{r})$:

$$|F_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{K_i}} |\Delta_i\rangle. \quad (3.70)$$

Zbiór funkcji $\{F_i\}$ rozpinia przestrzeń na którą rzutuje operator P . Można pokazać, że $\dim \mathcal{S} = N_s^3$. Zatem jeśli dana funkcja falowa $\psi \in \mathcal{S}$ to można ją przedstawić w postaci:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{i}} c_{\mathbf{i}} F_{\mathbf{i}}(\mathbf{r}), \quad (3.71)$$

gdzie współczynniki rozwinięcia są wyznaczone jednoznacznie oraz dane przez wartości funkcji falowej ψ na węzłach sieci:

$$c_{\mathbf{i}} = \int d^3 \mathbf{r} F_{\mathbf{i}}^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{K_{\mathbf{i}}}} \psi(\mathbf{r}_{\mathbf{i}}). \quad (3.72)$$

Z powyższego wynika, że w praktyce zdefiniowanie problemu na sieci sprowadza się do transformacji funkcji zmiennej ciągłej w funkcje zmiennej dyskretnej oraz zastąpienie występujących całek przez sumy:

$$\hat{\psi}_{\lambda}(\mathbf{r}) \rightarrow \hat{\psi}_{\lambda}(\mathbf{r}_{\mathbf{i}}), \quad (3.73)$$

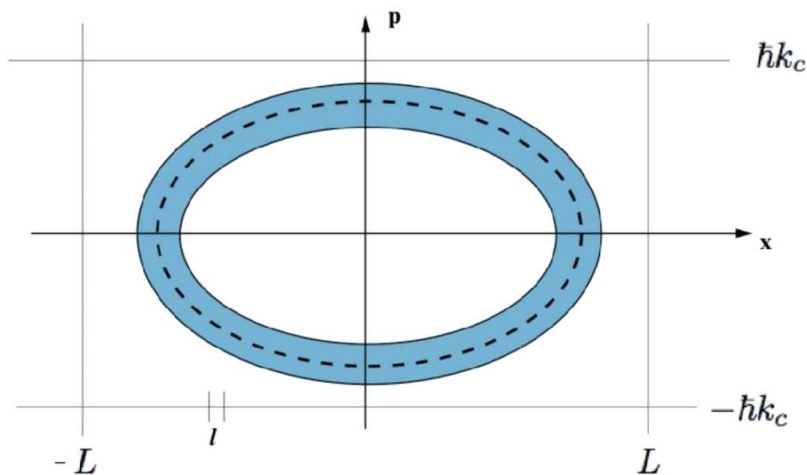
$$\int d^3 \mathbf{r} \rightarrow l^3 \sum_{\mathbf{i}}, \quad (3.74)$$

$$\int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi)^3} \rightarrow \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{k}}. \quad (3.75)$$

Na przykład hamiltonian (3.66) przyjmuje postać:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \frac{1}{L^3} \sum_{\lambda=\uparrow\downarrow} \sum_{\mathbf{k}} \frac{p_{\mathbf{k}}^2}{2m} \hat{n}_{\lambda}(\mathbf{p}_{\mathbf{k}}) - \frac{l^3}{2} \sum_{\lambda=\uparrow\downarrow} \sum_{\mathbf{i}} V(0) \hat{n}_{\lambda}(\mathbf{r}_{\mathbf{i}}) \\ & + \frac{l^6}{2} \sum_{\lambda,\lambda'=\uparrow\downarrow} \sum_{\mathbf{i},\mathbf{j}} V(\mathbf{r}_{\mathbf{i}} - \mathbf{r}'_{\mathbf{j}}) \hat{n}_{\lambda}(\mathbf{r}_{\mathbf{i}}) \hat{n}_{\lambda'}(\mathbf{r}'_{\mathbf{j}}). \end{aligned} \quad (3.76)$$

Obliczenia na sieci w naturalny sposób wprowadzają dwie skale obcięcia: *obcięcie podczerwone* związane ze skończonym rozmiarem pudła $L = N_s l$ oraz *obcięcie nadfioletowe* $p_{\text{cut}} = \pi/l$



Rysunek 3.1: Przestrzeń fazowa symulowanego problemu fizycznego. Linia przerywana przedstawia trajektorię klasyczną, niebieski obszar reprezentuje fluktuacje kwantowe wokół tej trajektorii. Błędy systematyczne związane z dyskretyzacją przestrzeni są eksponencjalnie małe jeśli niebieski obszar (trajektoria semiklasyczna) całkowicie zawarty jest w podprzestrzeni fazowej ograniczonej przez rozmiar pudła $L = lN_s$ oraz pęd obcięcia $p_{\text{cut}} = \hbar k_c = \pi/l$. Do pełnej kontroli obszaru podprzestrzeni fazowej wymagane jest równoczesne wykorzystanie dwóch parametrów: stałej sieci l oraz liczby węzłów sieci N_s . Rysunek z publikacji [39].

związane z maksymalną wartością pędu, jaki możemy zasymulować w obliczeniach. Istnienie tych dwóch skal obcięcia istotnie ogranicza klasę problemów fizycznych, które można z zadowalającą dokładnością symulować na sieci. W ramach wyżej zdefiniowanego formalizmu reprezentacji zmiennej dyskretnej można pokazać, że błędy generowane przez dyskretyzację przestrzeni maleją eksponencjalnie wraz ze wzrostem rozmiaru sieci, tj. $\text{err} \sim e^{-cN_s}$, jeśli semiklasyczny obszar przestrzeni fazowej, które chcemy symulować jest zawarty w podprzestrzeni ograniczonej przez rozmiar pudła oraz obcięcie nadfioletowe (patrz rysunek 3.1) [161]. Do kontroli obejmowanego obszaru semiklasycznego wykorzystuje się jednocześnie stałą sieci oraz rozmiar sieci, gdyż $L = N_s l$ oraz $p_{\text{cut}} = \pi/l$.

3.3 Rozpraszanie na sieci

Obliczenia na sieci, wraz z metodą Kwantowego Monte Carlo opisane w poprzednich podrozdziałach, dają możliwość wykonania w pełni nieperturbacyjnych obliczeń. Jednakże, podejście to niesie ze sobą pewne ograniczenia, znacznie zawężające zbiór układów fizycznych, które możemy w ten sposób badać. Dwa najważniejsze ograniczenia to:

1. zdefiniowanie problemu na sieci wprowadza pęd obciążenia $p_{\text{cut}} = \pi/l$, czyli maksymalną wartość pędu jaka może pojawić się w badanym problemie,
2. tylko dla odpowiednio prostych oddziaływań można znaleźć transformację Hubbarda-Stratonovicha, która nie prowadzi do problemu znaku.

W konsekwencji te dwa ograniczenia zawężają użyteczność metody tylko do badania układów fermionowych przy niskich energiach (relatywnie do $p_{\text{cut}}^2/2m$). W granicy niskich energii oddziaływanie pomiędzy cząstkami ma przede wszystkim charakter oddziaływania dwuciałowego. Ponadto może zostać opisane w terminach niewielkiej ilości parametrów, które charakteryzują niskoenergetyczne rozpraszanie np. długość rozpraszania i zasięg efektywny.

Podstawowy problemem stanowi wyznaczenie efektywnego oddziaływania dwuciałowego, które w sposób poprawny będzie opisywało niskoenergetyczne rozpraszanie cząstek w sytuacji, gdy problem jest zdefiniowany na sieci. Problem ten był rozważany przez M. Lüschera, który pokazał jak związać dyskretne spektrum energii dwóch cząstek uwięzionych w pudle o boku L z przesunięciami fazowymi δ_l [162]. Aby skorzystać z przepisu M. Lüschera należy wcześniej dokładnie wyznaczyć to dyskretne spektrum energii, co jest w ogólności złożonym zadaniem. Kolejna metoda została podana przez R. Sekiego i U. van Kolcka dla przypadku dużych sieci ($N_s \rightarrow \infty$). W ich podejściu, parametry oddziaływania wyznaczane są w ramach efektywnej teorii pola, co czyni metodę szczególnie użyteczną w przypadku niskoenergetycznych problemów jądrowych [163].

W dalszej części szczegółowo przedstawimy alternatywną, autorską metodę wyznaczania parametrów oddziaływania. Metoda w sposób poprawny uwzględnia wszystkie efekty związane z dyskretyzacją przestrzeni, tj. istnienie obciążenia podczerwonego i nadfioletowego, w granicy dużych sieci. Końcowy przepis nie wymaga wykonywania złożonych obliczeń, jak ma to miejsce w przypadku metody M. Lüschera i jest łatwy do numerycznej implementacji [164].

3.3.1 Oddziaływanie na sieci

Ogólna postać oddziaływania, po zdefiniowaniu problemu na sieci, wyraża się przez:

$$\hat{V} = \frac{l^6}{2} \sum_{\lambda, \lambda' = \uparrow \downarrow} \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} \hat{\psi}_{\lambda}^{\dagger}(\mathbf{r}_{\mathbf{i}}) \hat{\psi}_{\lambda'}^{\dagger}(\mathbf{r}_{\mathbf{j}}) V(\mathbf{r}_{\mathbf{i}} - \mathbf{r}_{\mathbf{j}}) \hat{\psi}_{\lambda'}(\mathbf{r}_{\mathbf{j}}) \hat{\psi}_{\lambda}(\mathbf{r}_{\mathbf{i}}). \quad (3.77)$$

Bardzo ważnym jest zauważenie, że w przypadku obliczeń na sieci, wymagana jest jedynie znajomość wartości potencjału oddziaływania tylko dla dyskretnego zbioru względnych położeń $\mathbf{R}_{k(i,j)} = \mathbf{r}_{\mathbf{i}} - \mathbf{r}_{\mathbf{j}}$. Informacja o wartościach potencjału dla pozostałych względnych położeń

jest zbędna. Z tego powodu, wystarczające jest wprowadzenie *oddziaływania na sieci* zdefiniowanego jedynie dla względnych położenia węzłów sieci. Oddziaływanie to można zapisać jako:

$$V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{l^3} \sum_{k=1}^D g_k \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}' - \mathbf{R}_k), \quad (3.78)$$

gdzie D określa liczbę względnych położenia węzłów sieci \mathbf{R}_k , dla których wartość potencjału oddziaływania nie jest zero. Stałe sprzężenia g_k zawierają pełną informację o oddziaływaniu pomiędzy cząstkami.

Najprostszy przypadek oddziaływania na sieci odpowiada sytuacji, gdy jedyna niezerowa stała sprzężenia g_k odpowiada względnemu położeniu $\mathbf{R}_k = (0, 0, 0)$ ($D = 1$). Jest to tzw. *model Hubbarda*:

$$\hat{V} = g_0 l^3 \sum_{\mathbf{i}} \hat{n}_{\uparrow}(\mathbf{r}_{\mathbf{i}}) \hat{n}_{\downarrow}(\mathbf{r}_{\mathbf{i}}). \quad (3.79)$$

Model ten powszechnie jest używany w fizyce ciała stałego. Jak pokażemy to w dalszej części, jedna stała sprzężenia g_0 pozwala w pełni kontrolować długość rozpraszania. Z tego powodu, model ten jest również wykorzystywany do opisu zimnych gazów atomowych [35, 36, 37, 38, 39, 90].

Bardziej złożony przypadek oddziaływania na sieci prowadzi do tzw. *rozszerzonego modelu Hubbarda* ($D = 7$) [22]. Model ten wymaga efektywnie dwóch niezerowych stałych sprzężenia (ze względu na symetrię rotacyjną hamiltonianu): g_0 dla $\mathbf{R} = (0, 0, 0)$ (oddziaływanie na węzle) oraz g_1 dla $\mathbf{R} \in \{(\pm l, 0, 0), (0, \pm l, 0), (0, 0, \pm l)\}$ (oddziaływanie z najbliższym sąsiadem). Wtedy oddziaływanie przyjmuje postać:

$$\hat{V} = g_0 l^3 \sum_{\mathbf{i}} \hat{n}_{\uparrow}(\mathbf{r}_{\mathbf{i}}) \hat{n}_{\downarrow}(\mathbf{r}_{\mathbf{i}}) + \frac{g_1}{2} l^3 \sum_{\lambda, \lambda' = \uparrow \downarrow} \sum_{\langle \mathbf{i}, \mathbf{j} \rangle} \hat{n}_{\lambda}(\mathbf{r}_{\mathbf{i}}) \hat{n}_{\lambda'}(\mathbf{r}_{\mathbf{j}}), \quad (3.80)$$

gdzie $\langle \mathbf{i}, \mathbf{j} \rangle$ oznacza sumę po wszystkich sąsiadujących ze sobą węzłach. Dwie stałe sprzężenia pozwalają na kontrolę długości rozpraszania i zasięgu efektywnego. Z tego powodu, model ten można wykorzystywać do symulacji bardziej złożonych układów fizycznych, np. rozrzedzonej materii neutronowej.

3.3.2 Macierz przejścia T

Celem tego podrozdziału jest znalezienie relacji wiążących stałe sprzężenia oddziaływania g_k z parametrami charakteryzującymi niskoenergetyczne rozpraszanie, takimi jak długość rozpraszania a i zasięg efektywny r_{eff} . Relacje te można otrzymać znajdując elementy macierzowe

operatora przejścia T i następnie, korzystając z niskoenergetycznego *rozwinienia zasięgu efektywnego* [7, 165]:

$$-\frac{4\pi}{m}T_{\mathbf{pp}}^{-1} \approx -\frac{1}{a} + \frac{1}{2}r_{\text{eff}}p^2 - ip + O(p^4). \quad (3.81)$$

Elementy macierzowe operatora przejścia znajdujemy rozwiązując równanie Lippmanna - Schwingera dla macierzy T :

$$T_{\mathbf{pp}'} = V_{\mathbf{pp}'} + \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{pk}} G_{\mathbf{p}'\mathbf{k}} T_{\mathbf{kp}'}, \quad (3.82)$$

gdzie:

$$G_{\mathbf{pp}'} = \frac{m}{p^2 - p'^2}, \quad (3.83)$$

jest propagatorem cząstki swobodnej o masie zredukowanej $m/2$. Ponieważ wykonujemy obliczenia na sieci, wartości pędu są dyskretne i ograniczone do pierwszej strefy Brillouina.

Równanie Lippmanna-Schwingera można zapisać w formie iteracyjnej, która jest bardziej wygodna dla praktycznych zastosowań. Rozwijając równanie (3.82) otrzymujemy:

$$T_{\mathbf{pp}'} = V_{\mathbf{pp}'} + \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{pk}} G_{\mathbf{p}'\mathbf{k}} V_{\mathbf{kp}'} + \frac{1}{L^6} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{pk}} G_{\mathbf{p}'\mathbf{k}} V_{\mathbf{kk}'} G_{\mathbf{p}'\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}'\mathbf{p}'} + \dots \quad (3.84)$$

Jeśli zdefiniujemy macierz $M^{(1)}$ jako:

$$M_{\mathbf{pp}'}^{(1)} = \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{pk}} G_{\mathbf{p}'\mathbf{k}} M_{\mathbf{kp}'}^{(0)}, \quad (3.85)$$

gdzie $M_{\mathbf{pp}'}^{(0)} = V_{\mathbf{pp}'}$, równanie (3.84) można zapisać w postaci:

$$T_{\mathbf{pp}'} = M_{\mathbf{pp}'}^{(0)} + M_{\mathbf{pp}'}^{(1)} + \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{pk}} G_{\mathbf{p}'\mathbf{k}} M_{\mathbf{kp}'}^{(1)} + \dots \quad (3.86)$$

Podobnie definiując kolejne macierze $M^{(n)}$ ($n \geq 1$) jako:

$$M_{\mathbf{pp}'}^{(n+1)} = \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{pk}} G_{\mathbf{p}'\mathbf{k}} M_{\mathbf{kp}'}^{(n)}. \quad (3.87)$$

można pokazać, że:

$$T_{\mathbf{pp}'} = M_{\mathbf{pp}'}^{(0)} + M_{\mathbf{pp}'}^{(1)} + M_{\mathbf{pp}'}^{(2)} + \dots \quad (3.88)$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} M_{\mathbf{pp}'}^{(n)}. \quad (3.89)$$

Równanie (3.89) jest prawdziwe w ogólności. Jednakże, w przypadku procesów niskoenergetycznych, gdy rozwinięcie zasięgu efektywnego (3.81) jest uzasadnione, wystarczająca jest

jedynie znajomość diagonalnych elementów macierzowych operatora T . Równoważne to jest znajomości diagonalnych elementów macierzy $M^{(n)}$. Elementy te można wyznaczyć dokładnie w przypadku oddziaływania na sieci (3.78). Wkład $M^{(0)}$ przyjmuje postać:

$$M_{\mathbf{pp}}^{(0)} = \sum_{i=1}^D g_i e^{-i\mathbf{p}\mathbf{R}_i} e^{i\mathbf{p}\mathbf{R}_i} \quad (3.90)$$

$$= \text{Tr } L^{(0)}, \quad (3.91)$$

gdzie kwadratowa macierz $L^{(0)}$ o wymiarach $D \times D$ jest zdefiniowana jako:

$$L_{ij}^{(0)} = g_i e^{-i\mathbf{p}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)}. \quad (3.92)$$

Dla wkładu $M^{(1)}$ otrzymujemy:

$$\begin{aligned} M_{\mathbf{pp}}^{(1)} &= \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{i=1}^D g_i e^{-i\mathbf{p}\mathbf{R}_i} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} G_{\mathbf{pk}} \sum_{j=1}^D g_j e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} e^{i\mathbf{p}\mathbf{R}_j} \\ &= \sum_{i,j=1}^D g_i g_j e^{-i\mathbf{p}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} G_{\mathbf{p}}(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i) = \sum_{i,j=1}^D g_j L_{ij}^{(0)} G_{\mathbf{p}}(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i) \\ &= \text{Tr } L^{(1)}, \end{aligned} \quad (3.93)$$

gdzie:

$$L_{ij}^{(1)} = \sum_{k=1}^D g_k L_{ik}^{(0)} G_{\mathbf{p}}(\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_j), \quad (3.94)$$

$$G_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} G_{\mathbf{pk}}. \quad (3.95)$$

Postępując podobnie dla kolejnych wkładów jak dla wkładu $M^{(1)}$ można pokazać, że:

$$T_{\mathbf{pp}} = \sum_{n=0}^{\infty} \text{Tr } L^{(n)} \quad (3.96)$$

gdzie:

$$L_{ij}^{(n+1)} = \sum_{k=1}^D g_k L_{ik}^{(n)} G_{\mathbf{p}}(\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_j), \quad (3.97)$$

$$L_{ij}^{(0)} = g_i e^{-i\mathbf{p}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)}. \quad (3.98)$$

Problem wyznaczenia diagonalnych elementów macierzy przejścia T został sprowadzony do sumowania śladów macierzy o stosunkowo małych wymiarach - wymiar macierzy $L^{(n)}$ wynosi $D \times D$. Ważną cechą wyniku (3.96) jest to, że efekty związane ze skończoną wartością stałej sieci l są w sposób poprawny uwzględniane przy obliczaniu macierzy T . Zależność od stałej sieci zawarta jest poprzez względne położenia węzłów sieci $\mathbf{R}_i(l)$.

Zbadajmy przypadek dużych sieci, wykonując przejście graniczne $L \rightarrow \infty$ podczas gdy stała sieci l pozostaje ustalona. W tej granicy pęd staje się ciągły wewnątrz pierwszej strefy Brillouina i sumowanie może zostać zastąpione przez całkowanie. W celu uproszczenia analizy zastosujemy sferycznie-symetryczne obcięcie w pędzie:

$$\int d^3\mathbf{p} \rightarrow \int_0^{2\pi} dp_\phi \int_0^\pi dp_\theta \cos p_\theta \int_0^{p_{\text{cut}}} dp p^2, \quad (3.99)$$

gdzie $p_{\text{cut}} = \pi/l$. Procedura ta usuwa wszystkie dwuciałowe elementy macierzowe jeśli względny pęd cząstek biorących udział w rozproszeniu przekracza ustaloną wartość p_{cut} . Zastosowanie takiej procedury pozwala na analityczne obliczenie propagatora $G_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$ danego wzorem (3.95). Wykonując całkę po kątach dp_ϕ i dp_θ otrzymujemy:

$$G_{\mathbf{p}}(r) = \frac{m}{2\pi^2 r} \int_0^{p_{\text{cut}}} dk k \frac{\sin kr}{p^2 - k^2}. \quad (3.100)$$

Pozostałą całkę można analitycznie wykonać rozwijając funkcję $\sin kr$ w szereg Taylora oraz dodatkowo wykorzystując zależność:

$$\frac{1}{x + i0^+} = \mathcal{P} \frac{1}{x} - i\pi\delta(x), \quad (3.101)$$

gdzie \mathcal{P} jest wartością główną. Końcowy wynik przyjmuje postać:

$$G_{\mathbf{p}}(r) = -\frac{m}{4\pi^2} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j r^{2j}}{(2j+1)!} F(j, p), \quad (3.102)$$

gdzie:

$$F(j, p) = \sum_{l=0}^j \frac{2p^{2l} p_{\text{cut}}^{2j-2l+1}}{2j-2l+1} + p^{2j+1} \ln \left| \frac{p_{\text{cut}} - p}{p_{\text{cut}} + p} \right| + i\pi p^{2j+1}. \quad (3.103)$$

Warto zauważyć, że funkcja $G_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$ zależy od wartości pędu obcięcia p_{cut} , zatem również parametry a i r_{eff} rozpraszania w ogólności będą zależały od pędu obcięcia. Wzory (3.96) - (3.98) oraz (3.102) są najbardziej użytecznymi wzorami dla praktycznych zastosowań.

3.3.3 Przykład: model Hubbarda

Jako przykład wykorzystania opisaney w poprzednim podrozdziale metody rozważmy model Hubbarda. Modelowi temu odpowiada oddziaływanie kontaktowe o zerowym zasięgu:

$$V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = g_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (3.104)$$

W tym szczególnym przypadku możliwe jest analityczne wyznaczenie relacji wiążących stałą sprzężenia g_0 z długością rozpraszania a i zasięgiem efektywnym r_{eff} . W celu znalezienia

tych relacji posłużymy się wzorem (3.96). Dla tego przypadku macierze $L^{(n)}$ stają się liczbami ($D = 1$) oraz łatwo pokazać, że:

$$L^{(n)} = g_0 (g_0 G_{\mathbf{p}})^n, \quad (3.105)$$

gdzie:

$$G_{\mathbf{p}} = G_{\mathbf{p}}(0) = -\frac{m}{4\pi^2} \left(2p_{\text{cut}} - p \ln \left| \frac{p + p_{\text{cut}}}{p - p_{\text{cut}}} \right| + i\pi p \right). \quad (3.106)$$

Szereg (3.96) staje się szeregiem geometrycznym, którego suma wynosi:

$$T_{\mathbf{pp}} = \frac{g_0}{1 - g_0 G_{\mathbf{p}}}. \quad (3.107)$$

Interesują nas odwrotności elementów diagonalnych macierzy przejścia T , dla małych wartości p . Rozwijając w szereg Taylora funkcję logarytmiczną:

$$\ln \left| \frac{p + p_{\text{cut}}}{p - p_{\text{cut}}} \right| \approx \frac{2}{p_{\text{cut}}} p + \frac{2}{3p_{\text{cut}}^3} p^3, \quad (3.108)$$

otrzymujemy:

$$-\frac{4\pi}{m} T_{\mathbf{pp}}^{-1} = -\frac{4\pi}{mg_0} - \frac{2p_{\text{cut}}}{\pi} + \frac{2}{\pi p_{\text{cut}}} p^2 - ip + \mathcal{O}(p^4). \quad (3.109)$$

Porównując powyższe wyrażenie z wyrażeniem (3.81) znajdujemy, że:

$$\frac{1}{a} = \frac{4\pi}{mg_0} + \frac{2p_{\text{cut}}}{\pi}, \quad (3.110)$$

$$r_{\text{eff}} = \frac{4}{\pi p_{\text{cut}}}. \quad (3.111)$$

Z powyższych wzorów widać, że za pomocą stałej sprzężenia g_0 możemy kontrolować tylko długość rozpraszania. W szczególności jeśli chcemy wykorzystać oddziaływanie kontaktowe do opisu gazu atomów, znajdujących się w granicy unitarnej ($a \rightarrow \pm\infty$), powinniśmy wybrać stałą sprzężenia równą:

$$g_0 = -\frac{2\pi^2}{mp_{\text{cut}}}, \quad (3.112)$$

która odpowiada oddziaływaniu przyciągającemu. Interesujące jest również spostrzeżenie, że wskutek istnienia skończonej wartości stałej sieci ($p_{\text{cut}} = \pi/l$) generowany jest niezerowy zasięg efektywny, niezależny od stałej sprzężenia. Prowadzi to do wniosku, że za pomocą modelu Hubbarda zdefiniowanego na sieci, nie jest możliwe wykonanie obliczeń dokładnie dla granicy unitarnej, gdyż ta wymaga aby $r_{\text{eff}} = 0$ (patrz podrozdział 1.3.3). Z drugiej strony $r_{\text{eff}} = \frac{4}{\pi^2} l \approx 0.4 l$, zatem wartość generowanego zasięgu efektywnego jest znacząco mniejsza niż zdolność rozdzielcza sieci.

3.4 Transformacja Hubbarda-Stratonovicha

W podrozdziale 3.1 pokazano, że operator $e^{-\beta\hat{H}}$ można zapisać jako całkę z pewnego operatora $e^{-\beta\hat{h}}$, gdzie \hat{h} jest operatorem jednociąłowym, jeśli dla części związanej z oddziaływaniem można dokonać przekształcenia:

$$e^{-\Delta\tau\hat{V}} = \int d\sigma e^{-\Delta\tau\hat{w}(\sigma)}, \quad (3.113)$$

gdzie \hat{w} jest operatorem jednociąłowym. W latach 50-tych zauważono, że przekształcenie takie możliwe jest, gdy oddziaływanie można zapisać w schematycznej formie $\hat{V} = \sum_i g_i \hat{Q}_i \hat{Q}_i$ gdzie $\hat{Q}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$ jest operatorem gęstości. Zamianę problemu wielociąłowego na całkę z problemów jednociąłowych można dokonać wykorzystując równość operatorową [166]:

$$e^{-\frac{1}{2}\Delta\tau\hat{Q}^2} = \sqrt{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\sigma e^{-\frac{1}{2}\sigma^2 - \sigma \sqrt{-\Delta\tau}\hat{Q}}, \quad (3.114)$$

gdzie \hat{Q} jest operatorem kwantowo-mechanicznym, $\Delta\tau$ pewną stałą. Przekształcenie to jest współcześnie znane jako transformacja Hubbarda-Stratonovicha. W późniejszych latach zidentyfikowano również inne sposoby dokonywania dekompozycji (3.113). J.E. Hirsch pokazał, że dla przypadku modelu Hubbarda można skonstruować tzw. *dyskretną transformację HS*, gdzie wystarczające jest aby dodatkowy stopień swobody σ przyjmował tylko dwie wartości [167]. Można to zapisać w ogólnej postaci:

$$e^{-\Delta\tau\hat{V}} = \sum_{\sigma=\pm 1} e^{-\Delta\tau\hat{w}(\sigma)}. \quad (3.115)$$

D. Lee natomiast pokazał, że możliwe jest również stworzenie tzw. *ograniczonej transformacji HS*, tj. całkowanie po zmiennej σ ograniczone jest tylko do pewnego przedziału (a, b) [168].

Ciągłe poszukiwanie nowych transformacji HS wynika z faktu, że do osiągnięcia pełnego sukcesu nie wystarczy tylko wykonanie dekompozycji (3.113). Zaproponowana transformacja HS musi prowadzić do nieujemnej i rzeczywistej wagi $P(\{\sigma\}) = \frac{\text{Tr } \hat{\mathcal{U}}(\{\sigma\})}{Z(\beta, \mu)}$. Tylko w takim przypadku możliwe jest praktyczne wykonanie pojawiającego się wielowymiarowego całkowania. W ogólności, tylko szczególna klasa transformacji HS generuje wagę o żądanych właściwościach. W paragrafie 3.1.1 pokazano, że do tej szczególnej klasy należą wszystkie transformacje postaci (tylko dla układów niespolaryzowanych):

$$e^{-\Delta\tau\hat{V}} = \int d\sigma e^{-\Delta\tau\hat{w}_\uparrow(\sigma)} e^{-\Delta\tau\hat{w}_\downarrow(\sigma)}. \quad (3.116)$$

W dalszej części pokażemy w jaki sposób skonstruować transformację HS, należącą do tej szczególnej klasy, dla modelu Hubbarda i rozszerzonego modelu Hubbarda.

3.4.1 Transformacja HS dla modelu Hubbarda

W modelu Hubbarda zdyskretyzowana wersja oddziaływania wyraża się przez:

$$\hat{V} = g_0 l^3 \sum_{\mathbf{i}} \hat{n}_{\uparrow}(\mathbf{r}_i) \hat{n}_{\downarrow}(\mathbf{r}_i). \quad (3.117)$$

Aby wykonać dekompozycję operatora $e^{-\Delta\tau\hat{V}}$ wystarczające jest znalezienie transformacji HS dla operatora $\exp[-\Delta\tau g_0 l^3 \hat{n}_{\uparrow}(\mathbf{r}_i) \hat{n}_{\downarrow}(\mathbf{r}_i)]$ ponieważ:

$$e^{-\Delta\tau\hat{V}} = e^{-\Delta\tau g_0 l^3 \sum_{\mathbf{i}} \hat{n}_{\uparrow}(\mathbf{r}_i) \hat{n}_{\downarrow}(\mathbf{r}_i)} = \prod_{\mathbf{i}} e^{-\Delta\tau g_0 l^3 \hat{n}_{\uparrow}(\mathbf{r}_i) \hat{n}_{\downarrow}(\mathbf{r}_i)}. \quad (3.118)$$

Postulujemy, że [39]:

$$e^{-\Delta\tau g_0 l^3 \hat{n}_{\uparrow}(\mathbf{r}_i) \hat{n}_{\downarrow}(\mathbf{r}_i)} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma_i = \pm 1} [1 + A\sigma_i \hat{n}_{\uparrow}(\mathbf{r}_i)][1 + A\sigma_i \hat{n}_{\downarrow}(\mathbf{r}_i)], \quad (3.119)$$

gdzie A jest stałą, którą należy wybrać w taki sposób aby równość była dokładnie spełniona. W tym celu rozwińmy prawą i lewą stronę równości (3.119) dla wszystkich możliwych wartości własnych operatora liczby obsadzeń stanu, tj. $n_{\lambda}(\mathbf{r}_i) \in \{0, 1\}$:

$$\begin{aligned} n_{\uparrow}(\mathbf{r}_i) = 0; \quad n_{\downarrow}(\mathbf{r}_i) = 0 : \quad 1 &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma_i = \pm 1} 1 = 1, \\ n_{\uparrow}(\mathbf{r}_i) = 1; \quad n_{\downarrow}(\mathbf{r}_i) = 0 : \quad 1 &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma_i = \pm 1} [1 + A\sigma_i] = 1, \\ n_{\uparrow}(\mathbf{r}_i) = 0; \quad n_{\downarrow}(\mathbf{r}_i) = 1 : \quad 1 &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma_i = \pm 1} [1 + A\sigma_i] = 1, \\ n_{\uparrow}(\mathbf{r}_i) = 1; \quad n_{\downarrow}(\mathbf{r}_i) = 1 : \quad e^{-\Delta\tau g_0 l^3} &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma_i = \pm 1} [1 + A\sigma_i]^2 = 1 + A^2. \end{aligned} \quad (3.120)$$

Widać, że wystarczające jest aby stała A spełniała równość: $e^{-\Delta\tau g_0 l^3} = 1 + A^2$, czyli $A = \sqrt{e^{-\Delta\tau g_0 l^3} - 1}$. Aby otrzymać rzeczywistą gęstość prawdopodobieństwa $P(\{\sigma\})$ żądamy aby stała A była liczbą rzeczywistą. Pociąga to za sobą ograniczenie na stałą sprzężenia g_0 : $e^{-\Delta\tau g_0 l^3} \geq 1$, co oznacza, że transformację tą można wykorzystać jedynie do badania układów z oddziaływaniem przyciągającym ($g_0 \leq 0$). Wykorzystując zależność (3.17), równanie (3.119) możemy przepisać w formie:

$$e^{-\Delta\tau g_0 l^3 \hat{n}_{\uparrow}(\mathbf{r}_i) \hat{n}_{\downarrow}(\mathbf{r}_i)} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma_i = \pm 1} e^{\ln[1+A\sigma_i] \hat{n}_{\uparrow}(\mathbf{r}_i)} e^{\ln[1+A\sigma_i] \hat{n}_{\downarrow}(\mathbf{r}_i)}, \quad (3.121)$$

co prowadzi do dodatkowego ograniczenia dla stałej sprzężenia mianowicie, funkcja logarytmiczna określona jest tylko dla dodatnich wartości argumentu tzn.: $1 + A\sigma_i > 0$. Ponieważ $\sigma_i = \pm 1$ otrzymujemy, że $A \in [0, 1)$ lub co jest równoważne:

$$1 \leq e^{-\Delta\tau g_0 l^3} < 2. \quad (3.122)$$

Otrzymany warunek określa zakres stosowalności zaproponowanej transformacji. W praktyce warunek ten dopuszcza wykonywanie symulacji dla zimnych gazów atomowych, znajdujących się we wszystkich trzech reżimach, tj.: BCS, unitarnym i BEC.

Podsumowując, końcowa postać transformacji HS dla modelu Hubbarda ma postać:

$$\begin{aligned} e^{-\Delta\tau\hat{V}} &= \prod_{\mathbf{i}} \frac{1}{2} \sum_{\sigma_{\mathbf{i}}=\pm 1} e^{\ln[1+A\sigma_{\mathbf{i}}]\hat{n}_{\uparrow}(\mathbf{r}_{\mathbf{i}})} e^{\ln[1+A\sigma_{\mathbf{i}}]\hat{n}_{\downarrow}(\mathbf{r}_{\mathbf{i}})} \\ &= \frac{1}{2^{N_s^3}} \sum_{\{\sigma_{\mathbf{i}}\}=\pm 1} \exp \left[\sum_{\mathbf{i},\lambda} \ln[1 + A\sigma_{\mathbf{i}}]\hat{n}_{\lambda}(\mathbf{r}_{\mathbf{i}}) \right], \end{aligned} \quad (3.123)$$

gdzie:

$$\sum_{\{\sigma_{\mathbf{i}}\}=\pm 1} = \sum_{\sigma_{(0,0,0)}=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_{(N_s,N_s,N_s)}=\pm 1} . \quad (3.124)$$

Łatwo można zauważyć, że równanie (3.123) posiada żądaną postać (3.116) jeśli przyjmiemy:

$$\hat{w}_{\lambda}(\{\sigma_{\mathbf{i}}\}) = -\frac{1}{\Delta\tau} \sum_{\mathbf{i}} \ln[1 + A\sigma_{\mathbf{i}}]\hat{n}_{\lambda}(\mathbf{r}_{\mathbf{i}}). \quad (3.125)$$

3.4.2 Transformacja HS dla rozszerzonego modelu Hubbarda

Dla rozszerzonego modelu Hubbarda zdyskretyzowana postać oddziaływania wyraża się przez:

$$\hat{V} = g_0 l^3 \sum_{\mathbf{i}} \hat{n}_{\uparrow}(\mathbf{r}_{\mathbf{i}})\hat{n}_{\downarrow}(\mathbf{r}_{\mathbf{i}}) + \frac{g_1}{2} l^3 \sum_{\lambda,\lambda'=\uparrow\downarrow} \sum_{\langle \mathbf{i},\mathbf{j} \rangle} \hat{n}_{\lambda}(\mathbf{r}_{\mathbf{i}})\hat{n}_{\lambda'}(\mathbf{r}_{\mathbf{j}}), \quad (3.126)$$

gdzie $\langle \mathbf{i}, \mathbf{j} \rangle$ oznacza sumę po wszystkich sąsiadujących ze sobą węzłach. Jak do tej pory nie udało się w ogólności skonstruować takiej transformacji HS, która w konsekwencji dawałaby nieujemną wagę dla próbkowania Monte Carlo. Zidentyfikowano jeden szczególny przypadek, dla którego transformacja o żądanych właściwościach istnieje. Przypadek ten odpowiada szczególnemu wyborowi stałych sprzężenia. Wymaga on aby $g_0 = 6g_1$ [169]. Fizycznie oznacza to, że wymagamy aby oddziaływanie z najbliższym sąsiadem było 6-krotnie słabsze niż oddziaływanie kontaktowe (na węzle). Warunek ten sprawia, że efektywnie dostajemy tylko jedną stałą sprzężenia g_1 . Ale model zawiera jeszcze jeden dodatkowy parametr: stałą sieci l , która określa odległość pomiędzy najbliższymi sąsiadami. Parametr ten możemy również zmieniać w pewnym zakresie wartości. Zatem dwa parametry, g_1 i l , możemy wykorzystać do kontrolowania dwóch parametrów charakteryzujących niskoenergetyczne rozpraszanie, tj. długość rozpraszania i zasięg efektywny. W praktycznych zastosowaniach okazuje się, że aby wygenerować żądaną wartość zasięgu efektywnego, stała sieci musi być tego samego rzędu co zasięg efektywny, tj. $l \simeq r_{\text{eff}}$. Ponieważ stała sieci kontroluje pęd obciążenia poprzez relację

$p_{\text{cut}} = \pi/l$, to zwiększanie stałej sieci oznacza zmniejszanie możliwych wartości pędu jakie możemy opisać, a co za tym idzie zmniejszanie gęstości. Oznacza to, że układy ze skończonym zasięgiem efektywnym możemy opisywać poprzez ten szczególny model tylko w obszarze niskich gęstości, np. dla materii neutronowej, gdzie $r_{\text{eff}} \approx 2.8$ fm górne ograniczenie na gęstość dla tego modelu wynosi $\rho_{\text{max}} \approx 0.03 \rho_0$.

W celu znalezienia transformacji HS przy założeniu, że $g_0 = 6g_1$ przepisujemy oddziaływanie (3.126) w równoważnej formie:

$$\hat{V} = \frac{g_1}{2} l^3 \sum_{\langle i,j \rangle} \left[\hat{n}_{\uparrow}(\mathbf{r}_i) \hat{n}_{\uparrow}(\mathbf{r}_j) + \hat{n}_{\uparrow}(\mathbf{r}_i) \hat{n}_{\downarrow}(\mathbf{r}_j) + \hat{n}_{\downarrow}(\mathbf{r}_i) \hat{n}_{\uparrow}(\mathbf{r}_j) + \hat{n}_{\downarrow}(\mathbf{r}_i) \hat{n}_{\downarrow}(\mathbf{r}_j) + \hat{n}_{\uparrow}(\mathbf{r}_i) \hat{n}_{\downarrow}(\mathbf{r}_i) + \hat{n}_{\uparrow}(\mathbf{r}_j) \hat{n}_{\downarrow}(\mathbf{r}_j) \right]. \quad (3.127)$$

Widoczne staje się, że każdy element tej sumy przyjmuje jedną z pięciu wartości:

$$\begin{cases} 0, & \text{jeśli } n_{\uparrow}(\mathbf{r}_i) + n_{\downarrow}(\mathbf{r}_i) + n_{\uparrow}(\mathbf{r}_j) + n_{\downarrow}(\mathbf{r}_j) = 0, \\ 0, & \text{jeśli } n_{\uparrow}(\mathbf{r}_i) + n_{\downarrow}(\mathbf{r}_i) + n_{\uparrow}(\mathbf{r}_j) + n_{\downarrow}(\mathbf{r}_j) = 1, \\ g_1 l^3 / 2, & \text{jeśli } n_{\uparrow}(\mathbf{r}_i) + n_{\downarrow}(\mathbf{r}_i) + n_{\uparrow}(\mathbf{r}_j) + n_{\downarrow}(\mathbf{r}_j) = 2, \\ 3g_1 l^3 / 2, & \text{jeśli } n_{\uparrow}(\mathbf{r}_i) + n_{\downarrow}(\mathbf{r}_i) + n_{\uparrow}(\mathbf{r}_j) + n_{\downarrow}(\mathbf{r}_j) = 3, \\ 6g_1 l^3 / 2, & \text{jeśli } n_{\uparrow}(\mathbf{r}_i) + n_{\downarrow}(\mathbf{r}_i) + n_{\uparrow}(\mathbf{r}_j) + n_{\downarrow}(\mathbf{r}_j) = 4, \end{cases} \quad (3.128)$$

gdzie $n_{\{\uparrow,\downarrow\}}(\mathbf{r}_{\{i,j\}})$ jest wartością własną operatora liczby obsadzeń. Właściwość ta umożliwia wprowadzenie dyskretnej transformacji HS w postaci:

$$e^{-\Delta\tau\hat{V}} = \prod_{\langle i,j \rangle} \frac{1}{k} \sum_{\sigma_{ij} \in \Sigma_k} e^{\sigma_{ij}[\hat{n}_{\uparrow}(\mathbf{r}_i) + \hat{n}_{\downarrow}(\mathbf{r}_i) + \hat{n}_{\uparrow}(\mathbf{r}_j) + \hat{n}_{\downarrow}(\mathbf{r}_j)]}, \quad (3.129)$$

gdzie teraz σ_{ij} przyjmuje wartości z k -elementowego zbioru $\Sigma_k = \{\sigma_1, \dots, \sigma_k\}$. Elementy zbioru Σ_k oraz jego liczebność k należy wybrać w taki sposób aby spełnione były równania:

$$\begin{cases} \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k e^{\sigma_i} = 1, \\ \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k e^{2\sigma_i} = e^{-\frac{\Delta\tau g_1 l^3}{2}}, \\ \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k e^{3\sigma_i} = e^{-\frac{3\Delta\tau g_1 l^3}{2}}, \\ \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k e^{4\sigma_i} = e^{-\frac{6\Delta\tau g_1 l^3}{2}}. \end{cases} \quad (3.130)$$

Układ równań należy rozwiązać numerycznie. W wyniku badań stwierdziliśmy, że rozwiązanie istnieje jeśli $k \geq 7$ i $g_1 < 0$, co odpowiada oddziaływaniu przyciągającemu.

Podsumowując, końcowa postać transformacji HS dla rozszerzonego modelu Hubbarda, gdy $g_0 = 6g_1$ ma postać:

$$e^{-\Delta\tau\hat{V}} = \frac{1}{k^{6N_s}} \sum_{\{\sigma_{ij}\} \in \Sigma_k} \exp \left[\sum_{\langle i,j \rangle, \lambda} \sigma_{ij} [\hat{n}_{\lambda}(\mathbf{r}_i) + \hat{n}_{\lambda}(\mathbf{r}_j)] \right], \quad (3.131)$$

gdzie wyrażenie $\sum_{\{\sigma_{ij}\} \in \Sigma_k}$ jest zdefiniowane analogicznie do (3.124). Jest oczywiste, że otrzymana transformacja HS jest zgodna z żadaną ogólną formą (3.116).

3.5 Funkcja spektralna

Metoda Kwantowego Monte Carlo opisana w podrozdziale 3.1, jest szczególnie użyteczna w przypadku obliczeń wartości oczekiwanych operatorów jedno lub dwuciałowych w funkcji temperatury. Tego rodzaju wyniki dostarczają jedynie statycznej informacji o układzie. Często taka informacja jest niewystarczająca. W celu lepszego poznania badanego układu pożądana jest znajomość dynamicznych właściwości.

Podstawową wielkością opisującą dynamiczne właściwości układu jest funkcja spektralna $A(\mathbf{p}, \omega)$, która dla układów fermionowych zdefiniowana jest jako [159]:

$$A_{\lambda\lambda'}(\mathbf{p}, \omega) = \int d^3\mathbf{r} \int dt e^{-i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \langle \{\hat{\psi}_\lambda(\mathbf{r}, t), \hat{\psi}_{\lambda'}^\dagger(\mathbf{0}, 0)\} \rangle. \quad (3.132)$$

Za pomocą teorii liniowej odpowiedzi układu możliwe jest powiązanie funkcji spektralnej z wieloma dynamicznymi wielkościami mierzonymi eksperymentalnie. Dzięki temu powiązaniu możliwe jest lepsze połączenie symulacji numerycznych z eksperymentem.

Na podstawie definicji (3.132) można pokazać, że funkcja spektralna spełnia następujące zależności:

$$A(\mathbf{p}, \omega) \geq 0, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} A(\mathbf{p}, \omega) = 1, \quad (3.133)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} A(\mathbf{p}, \omega) \frac{1}{1 + \exp(\omega\beta)} = n(\mathbf{p}), \quad (3.134)$$

gdzie $n(\mathbf{p})$ jest prawdopodobieństwem obsadzenia stanu o pędzie \mathbf{p} . W wyżej wymienionych wzorach pominięto wskaźniki spinowe λ , gdyż funkcja spektralna jest diagonalna w zmiennych spinowych. Diagonalność w zmiennych spinowych wynika z niezależności od spinu oddziaływań, które rozważamy w tej rozprawie.

Fizycznie, funkcję spektralną można traktować jako funkcję wagową, która określa możliwe spektrum dostępnych energii ω dla cząstki o pędzie \mathbf{p} w ośrodku. Łatwo można pokazać, że dla modelu niezależnych kwazicząstek funkcja spektralna przyjmuje bardzo prostą postać [159]:

$$A(\mathbf{p}, \omega) = 2\pi\delta(\omega - E(\mathbf{p})), \quad (3.135)$$

gdzie $E(\mathbf{p})$ jest energią kwazicząstki. Oznacza to, że dla kwazicząstki o pędzie \mathbf{p} dostępna jest tylko jedna energia $E(\mathbf{p})$ a co za tym idzie, że czas życia kwazicząstki jest nieskończenie

długi. W rzeczywistości, oddziaływanie pomiędzy cząstkami prowadzi do skończonego czasu życia stanów kwazicząstkowych. W takim przypadku funkcja spektralna jest istotnie różna od zera dla pewnego zbioru wartości (ω_1, ω_2) , najczęściej zlokalizowanych wokół wartości $E(\mathbf{p})$. Co więcej, można pokazać że szerokość tego przedziału tzn. $\Delta\omega = \omega_2 - \omega_1$ jest wielkością odwrotnie proporcjonalną do czasu życia kwazicząstki.

Na podstawie definicji (3.132) można zauważyć, że funkcja spektralna jest wielkością bardzo blisko związana z propagatorem cząstki (w czasie rzeczywistym):

$$\mathcal{G}_{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') = -i\langle \mathcal{T}_t[\hat{\psi}_\lambda(\mathbf{r}t)\hat{\psi}_{\lambda'}^\dagger(\mathbf{r}'t')] \rangle, \quad (3.136)$$

gdzie \mathcal{T}_t oznacza iloczyn chronologiczny operatorów. W istocie, znajomość propagatora w czasie rzeczywistym $\mathcal{G}_{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t')$ jest wystarczająca aby dokładnie wyznaczyć funkcję $A(\mathbf{p}, \omega)$. Jednak metoda Monte Carlo jest w stanie dostarczyć tylko wartości propagatora w czasie urojonym $\tau = it$. Zatem aby pozyskać funkcję spektralną, wymagane jest wykonanie przedłużenia analitycznego z osi czasu urojonego do czasów rzeczywistych. Cała procedura w praktyce sprowadza się do rozwiązania równania całkowego [170, 171]:

$$\mathcal{G}^<(\mathbf{p}, \tau) = - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} A(\mathbf{p}, \omega) \frac{e^{-\omega\tau}}{1 + e^{-\omega\beta}}. \quad (3.137)$$

Rozwiązanie problemu całkowego, danego równaniem (3.137), jest zadaniem bardzo trudnym. Trudności wynikają z faktu, że dla dużych wartości $|\omega|$ jądro równania:

$$\phi_\tau(\omega) = -\frac{1}{2\pi} \frac{e^{-\omega\tau}}{1 + e^{-\omega\beta}}, \quad (3.138)$$

przyjmuje wartości eksponencjalnie małe, tzn. $e^{-\tau\omega}$ dla $\omega > 0$ oraz $e^{(\beta-\tau)\omega}$ dla $\omega < 0$. Oznacza to, że $A(\omega)$ dla dużych $|\omega|$ zależy od subtelnych szczegółów propagatora w czasie urojonym $\mathcal{G}^<(\tau)$. Wiadomym jest, że w takiej sytuacji z matematycznego punktu widzenia problem jest źle postawiony, podobnie jak ma to miejsce dla odwrotnej transformacji Laplace'a. Sytuację pogarsza fakt, że w obliczeniach Monte Carlo otrzymujemy wartości propagatora w czasie urojonym tylko dla pewnego zbioru wartości $\{\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_{n_\tau}\}$ oraz dla każdej wartości τ_i wartość propagatora $\mathcal{G}^<(\tau_i)$ jest obarczona, charakterystyczną dla podejścia Monte Carlo, niepewnością statystyczną. Te niepewności statystyczne „przysłaniają” subtelne szczegóły propagatora, tak bardzo ważne przy wyznaczaniu $A(\omega)$.

Pomimo wyżej opisanych trudności możliwe jest rozwiązanie problemu (3.137) za pomocą specjalnie opracowanych do tego celu metod. Jest oczywiste, że w sytuacji gdy problem jest źle postawiony nie jest możliwe dokładne wyznaczenie funkcji spektralnej na podstawie informacji

o propagatorze w czasie urojonym. Jednak liczne testy wskazują na to, że wyznaczona funkcja spektralna poprzez rozwiązanie problemu odwrotnego jest bliska dokładnej funkcji spektralnej, danej równaniem (3.132). W dalszej części, zostaną dokładnie opisane dwie najważniejsze metody rozwiązywania równania (3.137) wraz z dokładną analizą wad i zalet tych metod.

3.5.1 Metoda SVD

Problem dany przez równanie (3.137) można przepisać w równoważnej formie:

$$\mathcal{G}_{\tau_i} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \phi_{\tau_i}(\omega) A(\omega) = (\phi_{\tau_i}, A), \quad (3.139)$$

gdzie $\mathcal{G}_{\tau_i} = \mathcal{G}^<(\tau_i)$ jest znane tylko dla dyskretnego zbioru punktów $\{\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_{n_\tau}\}$, $\phi_{\tau_i}(\omega) = -\frac{1}{2\pi} \frac{e^{-\omega\tau_i}}{1+e^{-\omega\beta}}$ oznacza jądro równania całkowego, (\cdot, \cdot) iloczyn skalarny. Zakładamy, że funkcja spektralna $A(\omega)$ jest obiektem pewnej M wymiarowej przestrzeni Hilberta \mathcal{A}_M . W ogólności przestrzeń ta jest nieskończenie wielowymiarowa, $M = \infty$. Jeśli ma miejsce sytuacja, że funkcje $\phi_\tau(\omega)$ są obiektami zawartymi w N wymiarowej podprzestrzeni $\mathcal{A}_N \subset \mathcal{A}_M$ dla każdego τ_i , gdzie $N < M$ to można pokazać, że problem jest źle postawiony tzn. istnieje nieskończenie wiele rozwiązań spełniających równanie (3.139). Sytuacja taka ma miejsce w przypadku rozważanego jądra równania całkowego. Aby udowodnić, że problem jest źle postawiony rozwińmy funkcje $\phi_\tau(\omega)$ i $A(\omega)$ w pewnej ortonormalnej bazie $\{\varphi_k\}$ przestrzeni \mathcal{A}_M :

$$\phi_\tau(\omega) = \sum_{k=1}^N f_{\tau k} \varphi_k(\omega), \quad (3.140)$$

$$\begin{aligned} A(\omega) &= \sum_{k=1}^M a_k \varphi_k(\omega) = \sum_{k=1}^N a_k \varphi_k(\omega) + \sum_{k=N+1}^M a_k \varphi_k(\omega) \\ &= A^\dagger(\omega) + A_\perp(\omega), \end{aligned} \quad (3.141)$$

gdzie $A^\dagger(\omega)$ oznacza rzut funkcji $A(\omega)$ na podprzestrzeń \mathcal{A}_N , natomiast $A_\perp(\omega)$ jest pozostałą częścią, która jest prostopadła do $A^\dagger(\omega)$, tzn. $(A^\dagger, A_\perp) = 0$. Wstawiając rozwinięcia (3.140) i (3.141) do wzoru (3.139) otrzymujemy:

$$\mathcal{G}_\tau = \sum_{k=1}^M \sum_{l=1}^N a_k f_{\tau l} (\varphi_k, \varphi_l) = \sum_{k=1}^N a_k f_{\tau k}, \quad (3.142)$$

gdzie skorzystano z $(\varphi_k, \varphi_l) = \delta_{kl}$. Ostatnia suma pokazuje, że \mathcal{G}_τ nie zależy od części A_\perp pełnego rozwiązania. Wszystkie funkcje, które mają takie same A^\dagger ale różne A_\perp spełniają

równanie (3.139). Wnioskujemy, że na podstawie punktów \mathcal{G}_{τ_i} możemy wyznaczyć co najwyżej A^\dagger w sposób jednoznaczny. Pokażemy, że jest to możliwe tylko w przypadku, gdy \mathcal{G}_{τ_i} są znane dokładnie, tzn. nie są obciążone niepewnościami. Rozwiązanie A^\dagger będziemy nazywali *rozwiązaniem normalnym*. Podprzestrzeń \mathcal{A}_N będziemy nazywali podprzestrzenią, w której problem jest dobrze postawiony.

W celu znalezienia rozwiązania $A^\dagger(\omega)$ wykorzystamy metodę bazującą na rozkładzie singularnym jądra równania całkowego, nazywaną często metodą SVD (ang. *Singular Value Decomposition*) [172, 173, 174]. Przepiszmy równanie (3.139) w formie operatorowej:

$$\vec{\mathcal{G}} = (\mathcal{K}A), \quad (3.143)$$

gdzie $\vec{\mathcal{G}} = (\mathcal{G}_{\tau_1}, \mathcal{G}_{\tau_2}, \dots, \mathcal{G}_{\tau_{n_\tau}})$ jest znanym z obliczeń Monte Carlo wektorem liczb. Wektor ten jest obiektem pewnej przestrzeni n_τ wymiarowej, którą będziemy oznaczać przez G_{n_τ} . \mathcal{K} jest operatorem całkowym równania (3.139), który transformuje obiekt z przestrzeni \mathcal{A}_N w obiekt należący do przestrzeni G_{n_τ} . Operator ten można traktować jako macierz o wymiarach $[n_\tau \times N]$ (w ogólności $N = \infty$). Operator sprzężony \mathcal{K}^* transformuje obiekt z przestrzeni G_{n_τ} w obiekt należący do przestrzeni \mathcal{A}_N i zdefiniowany jest poprzez równość iloczynów skalarnych w przestrzeniach G_{n_τ} i \mathcal{A}_N :

$$\sum_{i=1}^{n_\tau} (\mathcal{K}A)_{\tau_i} \mathcal{G}_{\tau_i} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega A(\omega) (\mathcal{K}^* \vec{\mathcal{G}})(\omega). \quad (3.144)$$

Operator \mathcal{K}^* można traktować jako macierz o wymiarach $[N \times n_\tau]$. Operator $\mathcal{K}\mathcal{K}^*$ reprezentowany jest przez kwadratową macierz o wymiarach $[n_\tau \times n_\tau]$. Na podstawie równań (3.139) i (3.144) można pokazać, że jego elementy macierzowe dane są przez:

$$(\mathcal{K}\mathcal{K}^*)_{ij} = (\phi_{\tau_i}, \phi_{\tau_j}) = \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{e^{-\omega(\tau_i + \tau_j)}}{[1 + e^{-\omega\beta}]^2}. \quad (3.145)$$

Operator $\mathcal{K}\mathcal{K}^*$ posiada r dodatnich wartości własnych $\{\sigma_i^2\}$, gdzie r jest rzędem operatora $\mathcal{K}\mathcal{K}^*$. Odpowiadające im wektory własne $\{\vec{v}_i\}$, tworzą bazę przestrzeni G_{n_τ} . Operator sprzężony $\mathcal{K}^*\mathcal{K}$ działa w przestrzeni \mathcal{A}_N i posiada również r dodatnich wartości własnych $\{\sigma_i^2\}$. Odpowiadające im funkcje własne $\{u_i(\omega)\}$ tworzą bazę w przestrzeni \mathcal{A}_N . Zbiory $\{\sigma_i^2\}$, $\{\vec{v}_i\}$ i $\{u_i\}$ tworzą tzw. *układ singularny* operatora \mathcal{K} i spełniają następujące równania:

$$\mathcal{K}u_i = \sigma_i \vec{v}_i, \quad \mathcal{K}^* \vec{v}_i = \sigma_i u_i. \quad (3.146)$$

Liczby $\{\sigma_i\}$ nazywamy *wartościami singularnymi*, zbiory $\{\vec{v}_i\}$ i $\{u_i\}$ odpowiednio *wektorami singularnymi* i *funkcjami singularnymi* operatora \mathcal{K} .

Rozwiązanie problemu (3.143) otrzymujemy zapisując wektor $\vec{\mathcal{G}}$ w bazie $\{\vec{v}_i\}$:

$$\vec{\mathcal{G}} = \sum_{i=1}^r (\vec{\mathcal{G}}, \vec{v}_i) \vec{v}_i = \mathcal{K} \left(\sum_{i=1}^r \frac{(\vec{\mathcal{G}}, \vec{v}_i)}{\sigma_i} u_i \right), \quad (3.147)$$

gdzie $(\vec{\mathcal{G}}, \vec{v}) = \sum_{k=1}^{n_\tau} \mathcal{G}_{\tau_k} v_k$ jest iloczynem skalarnym wektorów. W ostatnim przejściu wykorzystano pierwsze z równań (3.146). Porównując równanie (3.147) z równaniem (3.143) łatwo zauważamy, że:

$$A^\dagger(\omega) = \sum_{i=1}^{n_\tau} b_i u_i(\omega), \quad (3.148)$$

gdzie współczynniki rozwinięcia wyrażają się przez:

$$b_i = \frac{(\vec{\mathcal{G}}, \vec{v}_i)}{\sigma_i}. \quad (3.149)$$

W praktycznych zastosowaniach procedura znajdowania rozwiązania $A^\dagger(\omega)$ jest następująca:

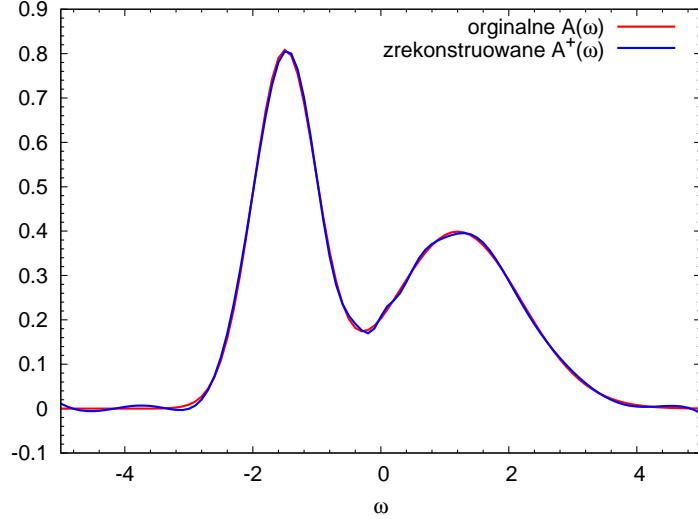
1. Diagonalizujemy macierz $\mathcal{K}\mathcal{K}^*$ daną równaniem (3.145), otrzymując w ten sposób wartości własne $\{\sigma_i^2\}$ i odpowiadające im wektory własne $\{\vec{v}_i\}$. Informacja ta jest wystarczająca aby obliczyć współczynniki rozwinięcia b_i .
2. Korzystając z definicji operatora sprzężonego \mathcal{K}^* oraz drugiego z równań (3.146) otrzymujemy, że funkcje singularne wyrażają się przez:

$$u_i(\omega) = \frac{1}{\sigma_i} \sum_{k=1}^{n_\tau} (\vec{v}_i)_k \phi_{\tau_k}(\omega) = -\frac{1}{2\pi\sigma_i} \sum_{k=1}^{n_\tau} (\vec{v}_i)_k \frac{e^{-\omega\tau_k}}{1 + e^{-\omega\beta}}. \quad (3.150)$$

Z równania (3.150) łatwo można zauważyć, że funkcje singularne $u_i(\omega)$ są funkcjami ciągłymi i gładkimi co oznacza, że produkowane rozwiązanie $A^\dagger(\omega)$ będzie również gładkie i ciągłe.

Rysunek 3.2 przedstawia przykładowy wynik działania metody SVD. Dla sztucznie utworzonej funkcji spektralnej $A(\omega)$ za pomocą wzoru (3.139) wygenerowaliśmy wartości propagatora \mathcal{G}_{τ_i} dla $n_\tau = 25$ punktów z przedziału $[0, \beta = 10]$. Następnie, korzystając z metody SVD znaleźliśmy rozwiązanie $A^\dagger(\omega)$. Liczne przeprowadzone testy numeryczne pokazują, że rzut rozwiązania na podprzestrzeń \mathcal{A}_N można uważać za bardzo dobre przybliżenie prawdziwego rozwiązania $A(\omega)$.

Rozwiązanie $A^\dagger(\omega)$ dane równaniem (3.148) można wykorzystywać w przypadku gdy wartości \mathcal{G}_{τ_i} znane są dokładnie. W sytuacji, gdy są one obarczone pewną niepewnością $\Delta\mathcal{G}_{\tau_i}$, problem staje się *źle uwarunkowany*. Zauważmy, że wartości singularne $\{\sigma_i\}$ oraz wektory i funkcje singularne $\{\vec{v}_i, u_i\}$ są w pełni wyznaczone przez jądro równania całkowego i nie są



Rysunek 3.2: Przykładowy wynik działania metody SVD. Dla sztucznie utworzonej funkcji spektralnej $A(\omega)$ za pomocą wzoru (3.139) wygenerowano wartości propagatora \mathcal{G}_{τ_i} dla $n_{\tau} = 25$ punktów z przedziału $[0, \beta = 10]$. Następnie, korzystając z metody SVD znaleziono rozwiązanie $A^{\dagger}(\omega)$.

obarczone niepewnościami. Niepewności $\Delta\mathcal{G}_{\tau_i}$ wpływają jedynie na współczynniki rozwinięcia b_i , które teraz wyznaczone są z pewną dokładnością:

$$\Delta b_i = \frac{(\Delta\vec{\mathcal{G}}, \vec{v}_i)}{\sigma_i}. \quad (3.151)$$

Jeśli wartości singularne $\{\sigma_i\}$ uporządkujemy w malejącej kolejności:

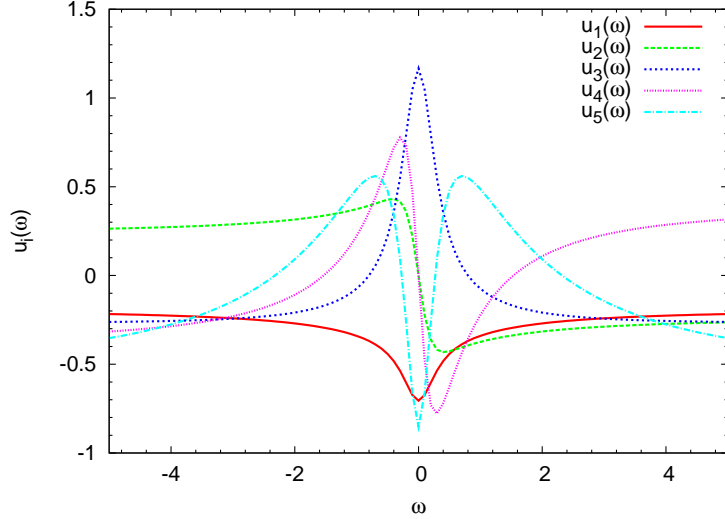
$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_r, \quad (3.152)$$

to zauważymy, że wraz ze wzrostem indeksu i funkcja singularna $u_i(\omega)$ jest funkcją coraz szybciej oscylującą i w konsekwencji każdy kolejny wyraz rozwinięcia odpowiada za odtwarzanie coraz dokładniejszych szczegółów rozwiązania $A^{\dagger}(\omega)$. Przykładowych pięć pierwszych funkcji singularnych przedstawia rysunek 3.3. Z drugiej strony, zmniejszanie wartości σ_i prowadzi do wzmacniania niepewności Δb_i , tj.:

$$\sigma_i \rightarrow 0 \quad \Rightarrow \quad \Delta b_i = \frac{(\Delta\vec{\mathcal{G}}, \vec{v}_i)}{\sigma_i} \rightarrow \infty. \quad (3.153)$$

Oznacza to, że w przestrzeni \mathcal{A}_N istnieją „kierunki”, dla których nie jesteśmy w stanie z zadowalającą dokładnością wyznaczyć współczynniki rozwinięcia b_i . Kierunki te są nazywane „niewidocznymi” dla metody SVD.

Standardowo stosowaną metodą jest usunięcie „niewidocznych” kierunków z rozwinięcia (3.148), tj. ograniczenie rozwinięcia do pierwszych $r_{\text{cut}} < r$ wyrazów, które wyznaczone są



Rysunek 3.3: Przykładowych pięć pierwszych funkcji singularnych $u_i(\omega)$. Wraz ze wzrostem indeksu i maleje odpowiadająca wartość singularna σ_i . Każda kolejna funkcja singularna $u_i(\omega)$ jest funkcją coraz szybciej oscylującą oraz odpowiada za odtwarzanie coraz dokładniejszych szczegółów rozwiązania $A^\dagger(\omega)$.

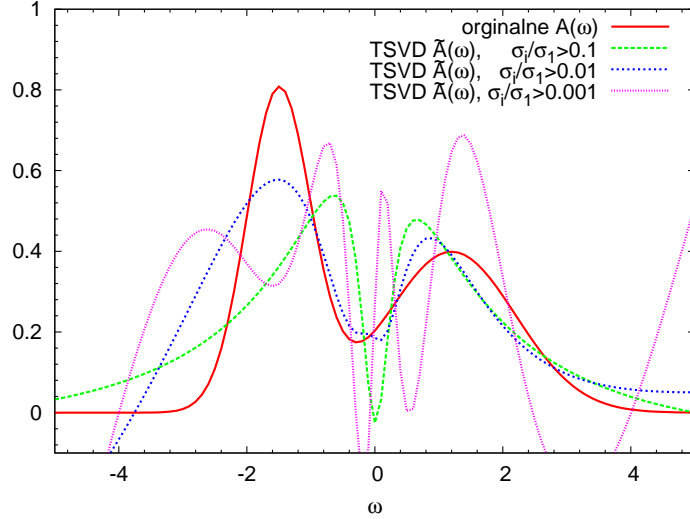
z zadowalającą dokładnością:

$$\tilde{A}(\omega) = \sum_{i=1}^{r_{\text{cut}}} b_i u_i(\omega). \quad (3.154)$$

Prowadzi to do tzw. obciętej metody SVD, oznaczanej w literaturze jako TSVD (ang. *Truncated Singular Value Decomposition*). Jest wiele sposobów wybierania punktu obcięcia r_{cut} . Najczęściej stosowane jest podejście, w którym usuwamy wszystkie wyrazy rozwinięcia, dla których $\frac{\sigma_i}{\sigma_1}$ jest wielkością mniejszą niż niepewność z jaką wyznaczone są punkty \mathcal{G}_{τ_i} , gdzie σ_1 jest największą wartością singularną. Tak skonstruowane rozwiązanie $\tilde{A}(\omega)$ odtwarza punkty \mathcal{G}_{τ_i} w ramach ich niepewności $\Delta\mathcal{G}_{\tau_i}$.

Przykład zastosowania metody TSVD przedstawia rysunek 3.4. Na podstawie sztucznie utworzonej funkcji spektralnej $A(\omega)$ za pomocą wzoru (3.139) wygenerowaliśmy wartości propagatora \mathcal{G}_{τ_i} dla $n_\tau = 25$ punktów z przedziału $[0, \beta = 10]$. Następnie, do każdej wartości propagatora dodano szum z rozkładu normalnego $\Delta\mathcal{G}_{\tau_i} = \mathcal{N}(0, \mathcal{G}_{\tau_i}/100)$. Funkcję spektralną zrekonstruowaliśmy za pomocą wzoru (3.154) dla trzech różnych wartości obcięcia. Zgodnie z opisaną powyżej metodą optymalne obcięcie r_{cut} otrzymamy, gdy zostawimy tylko wyrazy dla których $\frac{\sigma_i}{\sigma_1} \geq 0.01$. Uwzględnianie dalszych wyrazów powoduje coraz gorsze odtwarzanie prawdziwego rozwiązania, co wynika z dużych niepewności oszacowania współczynników b_i .

Metoda SVD daje również możliwość uwzględnienia wiedzy *a priori* o poszukiwanym rozwiązaniu. Celem wprowadzenia dodatkowej informacji o rozwiązaniu jest zwiększenie zdol-



Rysunek 3.4: Przykład zastosowania metody TSVD. Na podstawie sztucznie utworzonej funkcji spektralnej $A(\omega)$ za pomocą wzoru (3.139) wygenerowano wartości propagatora \mathcal{G}_{τ_i} dla $n_{\tau} = 25$ punktów z przedziału $[0, \beta = 10]$. Następnie do każdej wartości propagatora dodano szum z rozkładu normalnego $\Delta\mathcal{G}_{\tau_i} = \mathcal{N}(0, \mathcal{G}_{\tau_i}/100)$. Funkcję spektralną zrekonstruowano na podstawie wzoru (3.154) dla trzech różnych wartości obcięcia, tzn. uwzględniono tylko wyrazy, gdzie $\frac{\sigma_i}{\sigma_1}$ jest większe od zadanego progu. Rozwiązanie optymalne otrzymujemy uwzględniając tylko wyrazy dla których $\frac{\sigma_i}{\sigma_1} \geq 0.01$. Uwzględnienie dalszych wyrazów powoduje coraz gorsze odtwarzanie prawdziwego rozwiązania - zaczynamy uwzględniać w rozwiązaniu efekty związane z szumem.

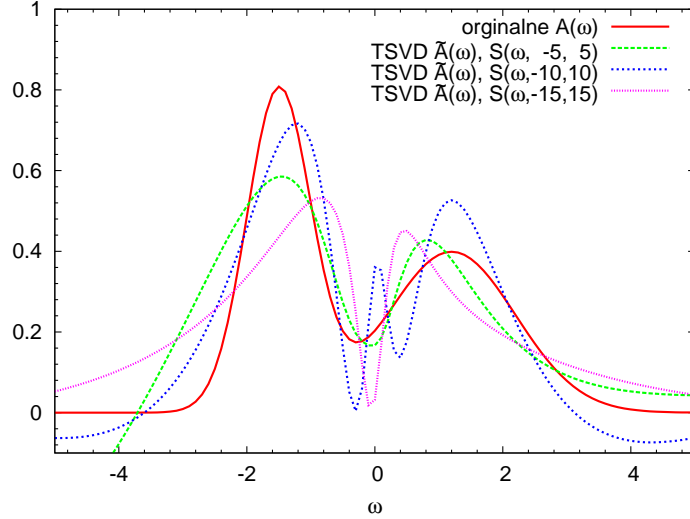
ności rekonstrukcyjnej opisywanej metody. Informację dodatkową może stanowić np. wiedza o obszarze zmienności ω , w którym poszukiwane rozwiązanie jest istotnie różne od zera. Informację tą możemy zapisać w postaci:

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{\tau_i} &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \phi_{\tau_i}(\omega) A(\omega) \\ &\cong \int_a^b d\omega \phi_{\tau_i}(\omega) A(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \phi_{\tau_i}(\omega) S(\omega, a, b) A(\omega), \end{aligned} \quad (3.155)$$

gdzie założyliśmy, że poszukiwane rozwiązanie $A(\omega)$ jest istotnie różne od zera tylko dla $\omega \in [a, b]$. W ostatnim wzorze funkcję $S(\omega, a, b)$ nazywamy *funkcją wsparcia*. Funkcja ta zdefiniowana jest jako:

$$S(\omega, a, b) = \begin{cases} 1, & \text{dla } \omega \in [a, b] \\ 0, & \text{dla } \omega \notin [a, b] \end{cases}. \quad (3.156)$$

Funkcję $\phi_{\tau_i}(\omega)S(\omega, a, b)$ można wykorzystać jako nowe jądro równania całkowego dla metody TSVD. Prowadzi to do dwóch ważnych konsekwencji: 1) wartości singularne σ_i maleją



Rysunek 3.5: Zrekonstruowane rozwiązanie metodą TSVD dla różnych funkcji wsparcia $S(\omega, a, b)$. Wartości propagatora zostały obliczone na podstawie sztucznie wygenerowanej funkcji spektralnej $A(\omega)$ dla $n_\tau = 25$ punktów i następnie losowo zaburzone. Widoczne jest, że wraz z lepszym określeniem przedziału, gdzie funkcja spektralne jest różna od zera, polepsza się zgodność rozwiązanie $\tilde{A}(\omega)$ z prawdziwym rozwiązaniem.

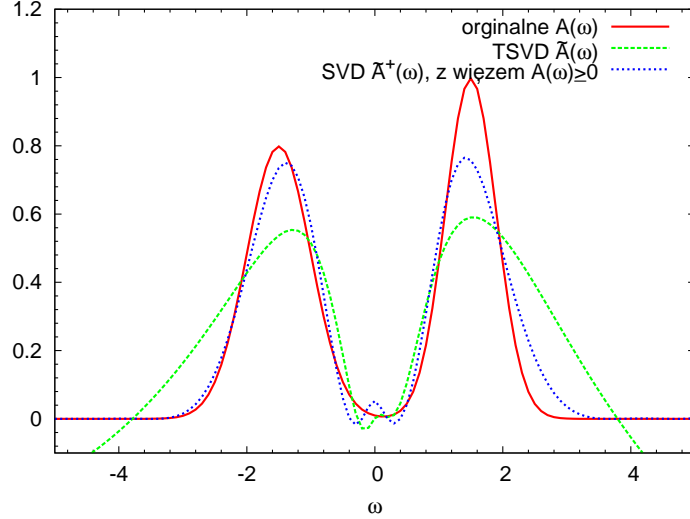
w szybszym tempie, dając mniejszą wartość obcięcia r_{cut} wraz z tym jak $b - a$ staje się coraz mniejsze, 2) funkcje singularne $u_i(\omega)$ zostają ograniczone do przedziału $[a, b]$. W konsekwencji węzły funkcji u_i są rozmieszczone bliżej siebie, dając lepszą rozdzielczość metody [174].

Na rysunku 3.5 przedstawiono zrekonstruowane rozwiązanie metodą TSVD dla różnych funkcji wsparcia $S(\omega, a, b)$. Podobnie jak w poprzednim przykładzie, wartości propagatora zostały losowo zaburzone szumem z rozkładu normalnego. Widoczne jest, że wraz z lepszym określeniem przedziału, gdzie funkcja spektralne jest różna od zera, polepsza się zgodność rozwiązania $\tilde{A}(\omega)$ z prawdziwym rozwiązaniem.

W ramach metody SVD możliwe jest również wygenerowanie rozwiązania posiadającego pewne żądane cechy, np. wiadomo, że funkcja spektralna jest nieujemna, tzn. $A(\omega) \geq 0$. W ogólności rozwiązanie TSVD nie spełnia tego warunku. Aby wygenerować rozwiązanie spełniające dodatkowe więzy zauważmy, że każde rozwiązanie postaci:

$$\tilde{A}^\dagger(\omega, \{\tilde{b}_i\}) = \sum_{i=1}^r \tilde{b}_i u_i(\omega), \quad (3.157)$$

gdzie $\tilde{b}_i \in (b_i - \Delta b_i, b_i + \Delta b_i)$ odtwarza wartości \mathcal{G}_{τ_i} w ramach niepewności $\Delta \mathcal{G}_{\tau_i}$. Wybierając odpowiedni zbiór współczynników $\{\tilde{b}_i\}$ możemy doprowadzić do otrzymania rozwiązania,



Rysunek 3.6: Wpływ dodatkowej informacji *a priori* na jakość zrekonstruowanego rozwiązania metodą SVD. Rozwiązania zrekonstruowano na podstawie $n_\tau = 25$ sztucznie wygenerowanych i następnie losowo zaburzonych punktów \mathcal{G}_{τ_i} z funkcją wsparcia $\mathcal{S}(\omega, -5, 5)$. Jako informację *a priori* wykorzystano $A(\omega) \geq 0$. Widoczna jest poprawa zgodności pomiędzy rozwiązaniem prawdziwym a zrekonstruowanym po uwzględnieniu dodatkowej informacji.

które posiada żądane cechy. W ogólności ma miejsce sytuacja, że istnieje wiele różnych zbiorów współczynników rozwinięcia $\{\tilde{b}_i\}$, które produkują rozwiązania spełniające zadane więzy. Z tego powodu wymagane jest wprowadzenie dodatkowego kryterium, którym należy się kierować przy wyborze „najlepszego” z możliwych rozwiązań. Ponieważ metoda SVD produkuje rozwiązanie posiadające minimalną normę, o czym łatwo można się przekonać przypominając sobie, że rozwiązanie $A^\dagger(\omega)$ jest rzutem na podprzestrzeń, gdzie problem jest dobrze postawiony, rozsądnym jest aby wybrać to rozwiązanie \tilde{A}^\dagger , które spełnia zadane więzy i ma najmniejszą normę. Ostatecznie problem uwzględniania dodatkowej informacji *a priori* sprowadza się do problemu optymalizacyjnego:

$$\tilde{A}^\dagger(\omega) = \min_{\{\tilde{b}_i\}} \|\tilde{A}^\dagger(\omega, \{\tilde{b}_i\})\| \quad (3.158)$$

z dodatkowymi więzami:

$$\forall i : b_i - \Delta b_i \leq \tilde{b}_i \leq b_i + \Delta b_i, \quad (3.159)$$

$$\forall \omega : \tilde{A}^\dagger(\omega, \{\tilde{b}_i\}) \geq 0, \quad (3.160)$$

inne dodatkowe więzy.

Przeprowadzone badania wskazują, że uwzględnianie w wyżej opisany sposób informacji *a priori* polepsza zgodność zrekonstruowanego rozwiązania z rozwiązaniem prawdziwym [175].

Na rysunku 3.6 przedstawiono zrekonstruowaną funkcję spektralną z uwzględnieniem dodatkowego ograniczenia $A(\omega) \geq 0$. Dla porównania przedstawiono również standardowe rozwiązanie TSVD. Rozwiązania zrekonstruowaliśmy na podstawie $n_\tau = 25$ sztucznie wygenerowanych i następnie losowo zaburzonych punktów \mathcal{G}_{τ_i} z funkcją wsparcia $S(\omega, -5, 5)$. Jak należało się spodziewać, widoczna jest poprawa zgodności pomiędzy rozwiązaniem prawdziwym a zrekonstruowanym po uwzględnieniu dodatkowej informacji.

3.5.2 Metoda maksymalnej entropii

Metoda maksymalnej entropii (MaxEnt) opiera się na podejściu statystycznym do problemu (3.137) [171, 176, 177, 178, 179]. W tym podejściu funkcja spektralna traktowana jest jako rozkład prawdopodobieństwa, co jest uzasadnione na mocy warunków (3.133). Główna idea metody polega na znalezieniu najbardziej prawdopodobnego rozwiązania na podstawie informacji o wartościach propagatora (danych) oraz pewnej dodatkowej informacji *a priori*.

Aby znaleźć najbardziej prawdopodobne rozwiązanie wykorzystuje się twierdzenie Bayesa:

$$\Pr[a, b] = \Pr[a|b] \Pr[b] = \Pr[b|a] \Pr[a], \quad (3.161)$$

gdzie $\Pr[a]$ jest prawdopodobieństwem zajścia zdarzenia a , $\Pr[a|b]$ prawdopodobieństwem zajścia zdarzenia a pod warunkiem że wystąpiło zdarzenie b , $\Pr[a, b]$ prawdopodobieństwem zajścia jednocześnie zdarzenia a i b . Na podstawie teorii prawdopodobieństwa zachodzą następujące zależności:

$$\int da \Pr[a] = 1, \quad (3.162)$$

$$\int da \Pr[a|b] = 1, \quad (3.163)$$

$$\int db \Pr[a, b] = \Pr[a], \quad (3.164)$$

$$\int db \Pr[a|b] \Pr[b] = \Pr[a]. \quad (3.165)$$

W przypadku problemu danego przez równanie (3.137) naszymi zdarzeniami są: otrzymanie w wyniku próbkowania Monte Carlo zbioru wartości $\{\tilde{\mathcal{G}}_{\tau_i}\}$ oraz znalezienie rozwiązania $A(\omega)$. Zbiór danych $\{\tilde{\mathcal{G}}_{\tau_i}\}$ traktujemy jako estymator prawdziwej funkcji $\mathcal{G}(\tau)$, którą otrzymalibyśmy na podstawie dokładnej funkcji spektralnej za pomocą równania (3.137). Wiadomo, że w wyniku próbkowania Monte Carlo otrzymujemy wartości pochodzące z rozkładu normalnego o średniej $\mathcal{G}(\tau_i)$ i odchyleniu standardowym σ_{τ_i} , tj. $\tilde{\mathcal{G}}_{\tau_i} \in \mathcal{N}(\mathcal{G}(\tau_i), \sigma_{\tau_i})$. Odchylenie standardowe

σ_{τ_i} zależy od liczby wylosowanych próbek N , $\sigma_{\tau_i} \sim 1/\sqrt{N}$. Poszukiwanie najbardziej prawdopodobnego rozwiązania jest równoważne maksymalizacji prawdopodobieństwa warunkowego znalezienia prawdziwego rozwiązania pod warunkiem, że znamy wynik symulacji $\Pr[A|\tilde{\mathcal{G}}]$, ze względu na funkcję $A(\omega)$. Na podstawie twierdzenia Bayesa otrzymujemy:

$$\Pr[A|\tilde{\mathcal{G}}] = \frac{\Pr[\tilde{\mathcal{G}}|A] \Pr[A]}{\Pr[\tilde{\mathcal{G}}]}. \quad (3.166)$$

Poprzez analogię do powszechnie znanej metody największej wiarygodności, prawdopodobieństwo $\Pr[A|\tilde{\mathcal{G}}]$ będziemy nazywali *prawdopodobieństwem a posteriori*, $\Pr[\tilde{\mathcal{G}}|A]$ *funkcją wiarygodności*, $\Pr[A]$ *prawdopodobieństwem a priori*.

Całkując równanie (3.166) ze względu na funkcje A i korzystając z (3.163) otrzymujemy, że:

$$\Pr[\tilde{\mathcal{G}}] = \int \mathcal{D}A \Pr[\tilde{\mathcal{G}}|A] \Pr[A]. \quad (3.167)$$

Oznacza to, że prawdopodobieństwo $\Pr[\tilde{\mathcal{G}}]$ nie zależy od poszukiwanego rozwiązania, lecz jedynie od konkretnego wyboru funkcji wiarygodności i prawdopodobieństwa *a priori*. Wyraz ten zatem może być traktowany jako stała normalizacyjna.

Ponieważ zakładamy, że $\tilde{\mathcal{G}}_{\tau_i} \in \mathcal{N}(\mathcal{G}(\tau_i), \sigma_{\tau_i})$, funkcję wiarygodności najlepiej wybrać taką samą jak dla klasycznego problemu dopasowania parametrów krzywej do danych eksperymentalnych. W takim przypadku stosuje się funkcję wiarygodności w formie:

$$\Pr[\tilde{\mathcal{G}}|A] \propto e^{-\frac{1}{2}\chi^2}, \quad (3.168)$$

gdzie:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{n_\tau} \left(\frac{\tilde{\mathcal{G}}_{\tau_i} - \mathcal{G}(\tau_i)}{\sigma_{\tau_i}} \right)^2. \quad (3.169)$$

Wyrażenie $\mathcal{G}(\tau_i)$ obliczamy dla zadanej funkcji $A(\omega)$ za pomocą wzoru (3.137). W praktycznych zastosowaniach poszukiwaną funkcję spektralną przedstawiamy jako wektor dyskretnych wartości na przedziale $(\omega_{\min}, \omega_{\max})$, tj. $\mathbf{A} = (A_1, \dots, A_{n_A})$, gdzie $A_k = A(\omega_k)$ oraz $\omega_k = \omega_{\min} + k\Delta\omega$, $n_A\Delta\omega = \omega_{\max} - \omega_{\min}$. Wtedy równanie (3.137) zapisane w dyskretniej formie ma postać:

$$\mathcal{G}(\tau_i) = \sum_{k=1}^{n_A} \frac{e^{-\omega_k\tau_i}}{1 + e^{-\omega_k\beta}} A_k \Delta\omega. \quad (3.170)$$

Wybór prawdopodobieństwa *a priori* $\Pr[A]$ stanowi najważniejszy i zarazem najtrudniejszy element całej metody maksymalnej entropii. Prawdopodobieństwo $\Pr[A]$ określa naszą wiedzę o funkcji spektralnej przed wykonaniem eksperymentu (symulacji numerycznej). Najprostszy

wybór polega na założeniu, że nie wiemy o poszukiwanym rozwiązaniu tzn. każde rozwiązanie jest równoprawdopodobne, $\Pr[A] \propto \text{const}$. W takiej sytuacji problem maksymalizacji prawdopodobieństwa *a posteriori* sprowadza się do problemu minimalizacji χ^2 , co jest równoważne metodzie najmniejszych kwadratów. Jednak w przypadku gdy użyjemy wielu wartości funkcji A_k , $n_A > n_\tau$ rozwiązanie nie jest wyznaczone w sposób jednoznaczny. Co więcej, takie podejście prowadzi do bardzo mocno oscylujących funkcji $A(\omega)$, co jest wynikiem zbyt mocnego dopasowania się do danych ($\chi^2 \approx 0$), które jak wiadomo są obarczone pewnym błędem. Wymagane jest zatem dostarczenie pewnej informacji o rozwiązaniu, która to w sposób jednoznaczny wyznaczy najbardziej prawdopodobne rozwiązanie. Najczęściej stosowane rozwiązanie polega na wyborze prawdopodobieństwa *a priori* w postaci [176]:

$$\Pr[A] \propto e^{\alpha S(\mathcal{M})}, \quad (3.171)$$

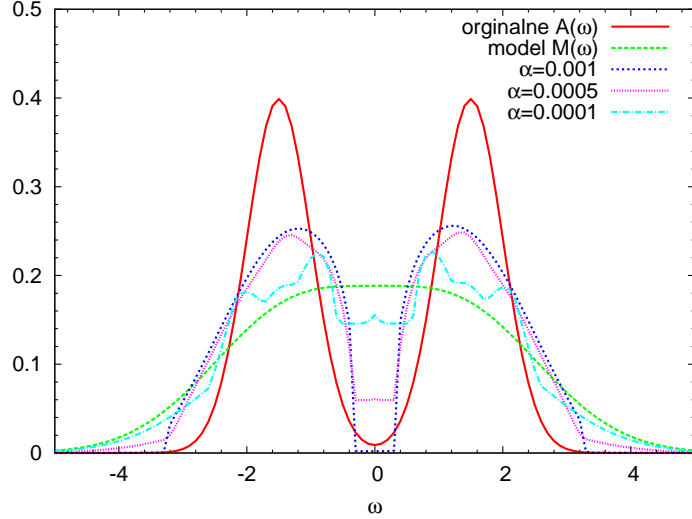
gdzie $\alpha > 0$. $S(\mathcal{M})$ jest *względną entropią informacyjną* daną przez:

$$S(\mathcal{M}) = \sum_{k=1}^{n_A} \Delta\omega \left[A(\omega_k) - \mathcal{M}(\omega_k) - A(\omega_k) \ln \left(\frac{A(\omega_k)}{\mathcal{M}(\omega_k)} \right) \right]. \quad (3.172)$$

Funkcję $\mathcal{M}(\omega)$ nazywamy *modelem domyślnym*. Entropia informacyjna osiąga maksymalną wartość równą zero gdy $A(\omega) = \mathcal{M}(\omega)$. W pozostałych przypadkach jest wartością ujemną, przy czym, im bardziej funkcja $A(\omega)$ różni się od zadanego modelu $\mathcal{M}(\omega)$ tym entropia staje się bardziej ujemna. Zadaniem dwóch pierwszych wyrazów, jest preferowanie rozwiązań, które mają taką samą normalizację co model domyślny, tzn.:

$$\sum_{k=1}^{n_A} \Delta\omega A(\omega_k) = \sum_{k=1}^{n_A} \Delta\omega \mathcal{M}(\omega_k). \quad (3.173)$$

Łatwo zauważyć, że model domyślny maksymalizuje prawdopodobieństwo *a posteriori* w przypadku braku danych, tj. określa najbardziej prawdopodobne rozwiązanie przed wykonaniem symulacji numerycznej. Od poprawnego wyboru modelu \mathcal{M} w dużym stopniu zależy końcowy wynik. Najczęściej stosowanym rozwiązaniem jest wybór modelu w postaci unormowanej funkcji Gaussa. Tak wybrana informacja preferuje rozwiązania które: 1) są funkcjami ciągłymi i gładkimi, 2) spełniają więzy (3.133). Maksimum funkcji Gaussa można umieścić dla $\omega = E(\mathbf{p})$, gdzie $E(\mathbf{p})$ jest energią kwazicząstek otrzymaną w ramach modelu niezależnych kwazicząstek. Innym stosowanym podejściem jest wykorzystanie jako modelu domyślnego rozwiązania otrzymanego w ramach pewnej metody przybliżonych obliczeń, np. jako model wykorzystujemy funkcję spektralną otrzymaną w ramach rachunku perturbacyjnego.



Rysunek 3.7: Przykład działania metody maksymalnej entropii. Wartości propagatora zostały obliczone na podstawie sztucznie wygenerowanej funkcji spektralnej $A(\omega)$ dla $n_\tau = 25$ punktów i następnie losowo zaburzone. Dla ustalonego modelu dokonano rekonstrukcji dla różnych wartości parametru α .

Podsumowując, na podstawie wzorów (3.166), (3.168) i (3.171) otrzymujemy, że prawdopodobieństwo *a posteriori* dane jest przez:

$$\Pr[A|\tilde{\mathcal{G}}] \propto e^{-\frac{1}{2}\chi^2 + \alpha S(\mathcal{M})}. \quad (3.174)$$

Stąd poszukiwanie najbardziej prawdopodobnego rozwiązania sprowadza się do problemu poszukiwania minimum wyrażenia $\frac{1}{2}\chi^2 - \alpha S(\mathcal{M})$ ze względu na funkcję $A(\omega)$. Zadaniem parametru α jest kontrola względnej ważności informacji pochodzącej z danych i informacji pochodzącej z modelu \mathcal{M} .

W praktycznych zastosowaniach aby jak najbardziej uniezależnić wynik końcowy od modelu domyślnego, minimalizację wielkości $\frac{1}{2}\chi^2 - \alpha S(\mathcal{M})$ przeprowadzono w sposób „samozgodny”, tzn.: w wyniku minimalizacji $\frac{1}{2}\chi^2 - \alpha S(\mathcal{M}_0)$ z modelem domyślnym $\mathcal{M}_0(\omega)$ otrzymujemy rozwiązanie $A_1(\omega)$. Rozwiązanie to przyjmowane jest jako nowy model domyślny dla kolejnej iteracji, tj: $\mathcal{M}_1(\omega) = A_1(\omega)$. Iteracje wykonywane są aż do momentu otrzymania samozgodności:

$$\min_{A(\omega)} \left[\frac{1}{2}\chi^2(A) - \alpha S(\mathcal{M}_n, A) \right] = \mathcal{M}_n. \quad (3.175)$$

Rysunek 3.7 przedstawia przykład działania opisanej metody. Na podstawie sztucznie utworzonej funkcji spektralnej $A(\omega)$ za pomocą wzoru (3.139), wygenerowaliśmy wartości propagatora \mathcal{G}_{τ_i} dla $n_\tau = 25$ punktów z przedziału $[0, \beta = 10]$. Następnie, do każdej warto-

ści propagatora dodano szum z rozkładu normalnego $\Delta\mathcal{G}_{\tau_i} = \mathcal{N}(0, \mathcal{G}_{\tau_i}/100)$. Dla ustalonego modelu, który znacząco różni się od oryginalnej funkcji spektralnej, dokonano rekonstrukcji dla różnych wartości parametru α . Widoczne jest, że dla małej wartości parametru α otrzymujemy oscylującą funkcję spektralną, co jest wynikiem zbyt dobrego dopasowania się do zaszumionych danych. Wraz ze wzrostem parametru α informacja *a priori* staje się coraz bardziej istotna. Informacja ta wymusza aby zrekonstruowana funkcja spektralna była funkcją gładką. Ważnym jest zauważenie, że pomimo tego, że model domyślny znacząco różni się od oryginalnej funkcji spektralnej, to zrekonstruowany wynik z dość dobrą dokładnością odtwarza oczekiwany wynik, jeśli $\alpha > 0.0003$. Na podstawie licznie przeprowadzonych przez nas testów numerycznych wynika, że istnieje dość dobrze określona wartość α_{crit} dla której następuje przejście pomiędzy rozwiązaniem „gładkim” a „nie gładkim” (w podanym przykładzie $\alpha_{\text{crit}} = 0.0003$). Obserwację tę można wykorzystać do wyboru „optymalnej” wartości parametru α , tzn. wykonujemy rekonstrukcję dla różnych wartości $\alpha_1 < \alpha_2 < \dots < \alpha_n$ a następnie jako końcowy wynik rekonstrukcji wybieramy wariant z minimalną wartością α_i dla której rozwiązanie jest „gładkie”.

3.6 Teoria skalowania dla układów skończonych

Metoda Kwantowego Monte Carlo zdefiniowana dla temperatur skończonych daje możliwość badania zjawisk krytycznych. Typowym przykładem zjawiska krytycznego dla układów fermionowych jest przejście fazowe pomiędzy stanem normalnym a nadciekłym (nadprzewodzącym w przypadku cząstek obdarzonych ładunkiem), które jak wiadomo zachodzi w odpowiednio niskich temperaturach. Aby pozyskać informację o zachowaniu krytycznym układu należy zbadać „właściwy” parametr porządku w funkcji temperatury. W teorii BCS przykładem takiego parametru porządku jest szczelina energetyczna $\Delta(T)$. W ogólności $\Delta(T)$ nie jest „właściwym” parametrem porządku. Z tego powodu dla układów fermionowych, w których spodziewamy się wystąpienia nadciekłości, rozważa się tzw. pozadiagonalny dalekozasięgowy parametr porządku (ang. *off-diagonal long-range order*) [180]. Dokładne określenie sposobu liczenia tego parametru w ramach formalizmu Monte Carlo będzie jednym z głównych elementów omówionych w tym podrozdziale.

Kolejnym ważnym aspektem omówionym w tym podrozdziale będzie wpływ na zachowanie krytyczne skończonych rozmiarów badanego układu. Należy pamiętać, że przemiana

fazowa to zjawisko kolektywne w którym uczestniczy cały układ. Wielkością, która szczególnie dobrze to obrazuje jest długość korelacji ξ_{corr} , która dla punktu krytycznego przyjmuje wartość nieskończoną, tj. $\xi_{\text{corr}}(T_c) \rightarrow \infty$ [181]. Zauważmy, że warunkowi tego nie można spełnić rozważając układ w pudle o boku L . Wiadomo jest, że efekty związane ze skończonymi rozmiarami układu w istotny sposób wpływają na właściwości układu w pobliżu punktu krytycznego. Z tego powodu wymagana jest metoda, która w sposób poprawny uwzględni efekty skończonego wymiaru układu. Powszechnie stosowane jest podejście oparte na teorii skalowania dla układów skończonych (ang. *finite size scaling*) [182, 183, 184]. Ponieważ teoria ta tworzy aktualnie bardzo rozbudowaną gałąź symulacji numerycznych Monte Carlo, w rozprawie zostaną jedynie opisane szczególne aspekty związane z wykorzystaniem tego podejścia do wyznaczenia temperatury krytycznej przejścia fazowego pomiędzy stanem normalnym a nadciekłym.

3.6.1 Parametr porządku

W celu wyznaczenia temperatury krytycznej przejścia fazowego należy rozważyć odpowiedni parametr porządku. Dla układów fermionowych, w których spodziewamy się wystąpienia nadciekłości lub nadprzewodnictwa rozważa się tzw. pozadiagonalny dalekozasięgowy parametr porządku. Przykładem takiego parametru jest dalekozasięgowe zachowanie się dwuciałowej macierzy gęstości [33, 180]:

$$\rho_2(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \langle \hat{\psi}_\uparrow^\dagger(\mathbf{r}'_1) \hat{\psi}_\downarrow^\dagger(\mathbf{r}'_2) \hat{\psi}_\downarrow(\mathbf{r}_2) \hat{\psi}_\uparrow(\mathbf{r}_1) \rangle. \quad (3.176)$$

Asymptotyczne zachowanie tej funkcji dla $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1|, |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_2| \rightarrow \infty$ ma postać (zakładamy, że układ jest jednorodny i posiada symetrię translacyjną):

$$\rho_2(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rightarrow \frac{\alpha N}{2} \varphi^*(|\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}'_2|) \varphi(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|), \quad (3.177)$$

gdzie N jest liczbą cząstek. Parametr $\alpha \in [0, 1]$, zwany współczynnikiem kondensacji, określa odsetek „skondensowanych” par Coopera. φ jest zespoloną funkcją unormowaną do odwrotności objętości ($1/V$), która jest proporcjonalna do znanego z teorii BCS parametru uporządkowania $\langle \hat{\psi}_\uparrow(\mathbf{r}_1) \hat{\psi}_\downarrow(\mathbf{r}_2) \rangle = \sqrt{\frac{\alpha N}{2}} \varphi(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$. Niezerowa wartość α jest sygnaturą istnienia stanu nadciekłego.

Dla dalszych rozważań wygodnie jest również wprowadzić jednociąlową macierz gęstości:

$$\rho_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \langle \hat{\psi}_\uparrow^\dagger(\mathbf{r}_1) \hat{\psi}_\uparrow(\mathbf{r}_2) \rangle. \quad (3.178)$$

Dla układów fermionowych asymptotyczne zachowanie jednociałowej macierzy gęstości ma postać: $\rho_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rightarrow 0$ gdy $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| \rightarrow \infty$.

Dla celów praktycznych wygodniej jest wykorzystać tzw. funkcję korelacji $g_2(\mathbf{r})$, którą otrzymujemy na podstawie dwuciałowej macierzy gęstości [33, 39]:

$$g_2(\mathbf{r}) = \left(\frac{2}{N}\right)^2 \int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \rho_2(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}, \mathbf{r}_2 + \mathbf{r}, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (3.179)$$

W przypadku nieoddziałującego gazu Fermiego funkcja ta wynosi:

$$g_2(\mathbf{r}) = \begin{cases} 3 \frac{j_1(p_F r)}{p_F r}, & \text{gdy } r > 0, \\ 1, & \text{gdy } r = 0. \end{cases} \quad (3.180)$$

Łatwo zauważyć, że tak zdefiniowana funkcja korelacji w przypadku nieskończonego układu jednorodnego spełnia relację:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \frac{N}{2} g_2(r) = \alpha, \quad (3.181)$$

i może zostać wykorzystana do wyznaczenia współczynnika kondensacji α . Jednak w przypadku, gdy układ jest umieszczony w pudle o boku L nie jest możliwe poprawne wykonanie przejścia granicznego $r \rightarrow \infty$. Z tego powodu rozważa się wielkość:

$$h(r) = \frac{N}{2} g_2(r) - g_1^2(r), \quad (3.182)$$

gdzie funkcję $g_1(r)$ otrzymuje się na podstawie jednociałowej macierzy gęstości:

$$g_1(\mathbf{r}) = \frac{2}{N} \int d^3\mathbf{r}_1 \rho_1(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}, \mathbf{r}_1). \quad (3.183)$$

Na podstawie definicji funkcji $h(r)$ łatwo zauważyć, że:

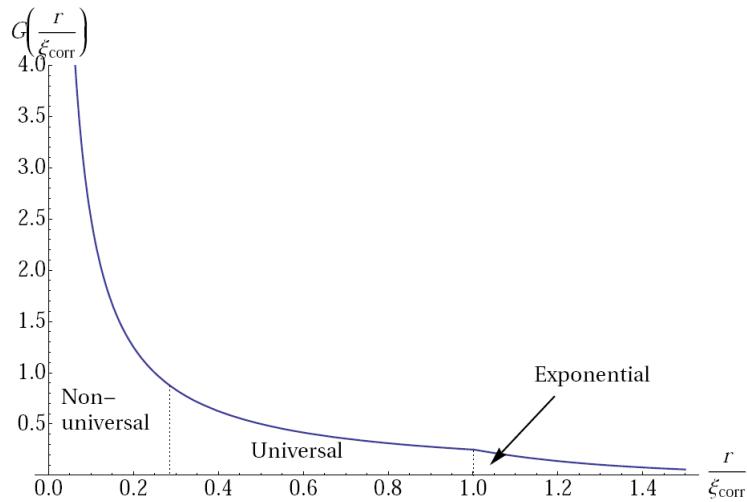
$$\lim_{r \rightarrow \infty} h(r) = \alpha, \quad (3.184)$$

przy czym można pokazać, że funkcja $h(r)$ szybciej zbiega do wartości α niż funkcja $\frac{N}{2} g_2(r)$. Z tego powodu już dla odległości porównywalnych z rozmiarem pudła, tj. $r \sim L$ można otrzymać dobre oszacowanie dla współczynnika kondensacji (pod warunkiem, że pudło jest wystarczająco duże) [33].

Funkcję $h(r)$ można łatwo wyznaczyć za pomocą metody Monte Carlo. W tym celu wystarczy wykorzystać wzory (3.39) i (3.47) na wartość oczekiwaną operatora jedno i dwuciałowego. Ostatecznie wzory na funkcje $g_1(\mathbf{r})$ i $g_2(\mathbf{r})$ przyjmują postać:

$$g_1(\mathbf{r}) = \frac{2}{N} \int \mathcal{D}\sigma P(\{\sigma\}) \int d^3\mathbf{r}_1 n_\uparrow(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}, \mathbf{r}_1, \{\sigma\}), \quad (3.185)$$

$$g_2(\mathbf{r}) = \left(\frac{2}{N}\right)^2 \int \mathcal{D}\sigma P(\{\sigma\}) \int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 n_\uparrow(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}, \mathbf{r}_1, \{\sigma\}) n_\downarrow(\mathbf{r}_2 + \mathbf{r}, \mathbf{r}_2, \{\sigma\}). \quad (3.186)$$



Rysunek 3.8: Schematyczna zależność ogólnej funkcji korelacyjnej od odległości. Odległość podana jest w jednostkach długości korelacji ξ_{corr} . Zaznaczone są trzy obszary gdzie: 1) funkcja zależy od szczegółów badanego systemu (ang. *non-universal*), 2) staje się uniwersalna, tj. przestaje zależeć od szczegółów rozważanego układu (ang. *universal*), 3) zanika wykładniczo. Rysunek z publikacji [39].

3.6.2 Temperatura krytyczna przejścia fazowego

W celu znalezienia temperatury krytycznej T_c przejścia fazowego, zbadajmy dokładniej właściwości ogólnej funkcji korelacyjnej G , której dobrymi przykładami są $g_2(r)$ lub $h(r)$ wprowadzone w poprzednim podrozdziale. Funkcja korelacyjna jest funkcją odległości r oraz temperatury T . Jednak w przypadku gdy rozważany układ jest zamknięty w pudle o boku L będzie ona również zależała od rozmiaru tego pudła tzn. $G = G(r, T, L)$.

Typową zależność funkcji korelacyjnej $G(r/\xi_{\text{corr}})$ od odległości przedstawia rysunek 3.8. ξ_{corr} oznacza długość korelacji, tj. odległość na której funkcja G maleje e razy. Dla małych odległości l w porównaniu z długością korelacji ξ_{corr} , G silnie zależy od szczegółów rozważanego układu. Mówimy, że dla małych odległości G nie jest funkcją uniwersalną. Dla odległości z przedziału $l \ll r < \xi_{\text{corr}}$ funkcja G przestaje zależeć od szczegółów rozważanego układu, tj. staje się uniwersalna. Teoria grupy renormalizacyjnej przewiduje bardzo specyficzne zachowanie się funkcji korelacyjnej w tym obszarze odległości. Dla układów fermionowych, gdzie spodziewamy się przejścia fazowego należącego do klasy uniwersalności $U(1)$, funkcja korelacyjna przyjmuje ogólną postać $G \propto r^{-(1+\eta)}$, gdzie $\eta \simeq 0.038$ jest uniwersalnym wykładnikiem krytycznym. Ostatecznie dla dużych odległości, $r > \xi_{\text{corr}}$, funkcja korelacyjna zanika

eksponencjalnie, tj. $G \propto e^{-r/\xi_{\text{corr}}}$. Bardzo ważne jest zauważenie, że dla temperatury krytycznej obszar gdzie G jest uniwersalne rozciąga się do nieskończoności, gdyż $\xi_{\text{corr}}(T_c) \rightarrow \infty$. Z drugiej strony w przypadku gdy układ jest zamknięty w pudle o skończonym rozmiarze L , długość korelacji ξ_{corr} dla temperatury bliskiej T_c jest ograniczona przez rozmiar tego pudła. Zatem wielkość:

$$R(L, T) = L^{1+\nu} G(r \rightarrow \infty, L, T), \quad (3.187)$$

powinna być niezależna od rozmiaru pudła, jeśli $T \rightarrow T_c$. Dokładne obliczenia w ramach teorii grupy renormalizacyjnej dla temperatur bliskich T_c prowadzą do zależności [182]:

$$R(L, T) = f(x)(1 + cL^{-\omega} + \dots), \quad (3.188)$$

gdzie $x = \left(\frac{L}{\xi_{\text{corr}}(T)}\right)^{1/\nu}$ oraz:

$$\xi_{\text{corr}}(T) \propto \left(\frac{|T_c - T|}{T_c}\right)^{-\nu}. \quad (3.189)$$

Dla klasy uniwersalności $U(1)$ wykładniki krytyczne wynoszą: $\nu = 0.671$, $\omega \simeq 0.8$. Funkcja $f(x)$ jest pewną uniwersalną funkcją, której dokładna postać jest nieistotna a c jest pewną stałą zależną od szczegółów układu. Jeśli wyraz $cL^{-\omega}$ jest pomijalny to rzeczywiście dla $T = T_c$ funkcja $R(L, T)$ staje się niezależna od rozmiaru pudła, tj. $R(L, T \rightarrow T_c) = f(0)$. Obserwację tę można wykorzystać do wyznaczenia temperatury krytycznej. Jeśli na jednym wykresie umieścimy wyniki obliczeń $R(L_i, T)$ w funkcji temperatury dla różnych wielkości pudła L_1, L_2, \dots, L_n to otrzymane krzywe powinny przecinać się dokładnie w jednym punkcie dla $T = T_c$ [35, 36]. Jest to podstawowy sposób wyznaczania temperatury krytycznej w ramach teorii skalowania dla układów skończonych.

W rzeczywistości $cL^{-\omega}$ jest wielkością skończoną co powoduje, że przecięcie krzywych $R(L_i, T)$ nie nastąpi dokładnie w jednym punkcie. Jednak wraz ze zwiększaniem wymiarów pudła, $L_{i,j} \rightarrow \infty$, temperatura dla której następuje przecięcie krzywych $R(L_i, T)$ i $R(L_j, T)$ zbiega do T_c . Wynika to z faktu, że $\omega > 0$ co prowadzi do: $cL^{-\omega} \rightarrow 0$ gdy $L \rightarrow \infty$. Zatem wykonując obliczenia na odpowiednio dużych sieciach możemy z zadowalającą dokładnością wyznaczyć temperaturę krytyczną. Co więcej, informację o położeniach przecięć dla różnych wielkości sieci można wykorzystać w celu dokładniejszego wyznaczenia T_c . Załóżmy, że T_{ij} jest temperaturą dla której następuje przecięcie krzywych R otrzymanych dla dwóch różnych wielkości pudła $L_i \neq L_j$, tj. $R(L_i, T_{ij}) = R(L_j, T_{ij})$. Zakładając, że T_{ij} jest blisko temperatury krytycznej, funkcję $f(x)$ można rozwinąć w szereg Taylora wokół punktu $x = 0$ ($T = T_c$):

$$f(x) = f(0) + f'(0)L^{1/\nu}b\frac{|T_c - T_{ij}|}{T_c} + \dots, \quad (3.190)$$

gdzie wykorzystano, że $\xi_{\text{corr}}(T) = b \left(\frac{|T_c - T|}{T_c} \right)^{-\nu}$. Następnie wykorzystując definicję T_{ij} oraz relację (3.188) otrzymujemy:

$$|T_c - T_{ij}| = \kappa g(L_i, L_j), \quad (3.191)$$

$$g(L_i, L_j) = L_j^{-(\omega + \frac{1}{\nu})} \left[\frac{\left(\frac{L_j}{L_i} \right)^\omega - 1}{1 - \left(\frac{L_i}{L_j} \right)^{1/\nu}} \right], \quad (3.192)$$

oraz $\kappa = \frac{cT_c f(0)}{b f'(0)}$. Zatem mając wyznaczone punkty T_{ij} dla różnych rozmiarów pudła (co najmniej dla trzech różnych L_i) można dopasować równanie (3.191) ze względu na parametry T_c i κ .

Rozdział 4

Wyniki

4.1 Parametry symulacji numerycznych

4.1.1 Parametry sieci

W obliczeniach wykorzystaliśmy sieci o rozmiarach $N_s = 8$ i $N_s = 10$. Wykorzystanie większych rozmiarów sieci prowadziło do nieakceptowalnie długich czasów obliczeń. Stałą sieci przyjęliśmy równą $l = 1u$, gdzie u jest jednostką w której będziemy wyrażali długości, np. $u = 1$ fm. Wybierając wartość u ustalamy jednostki dla wszystkich wielkości fizycznych obliczanych w symulacji Monte Carlo, np. energie będą wyrażane w jednostkach u^{-1} .

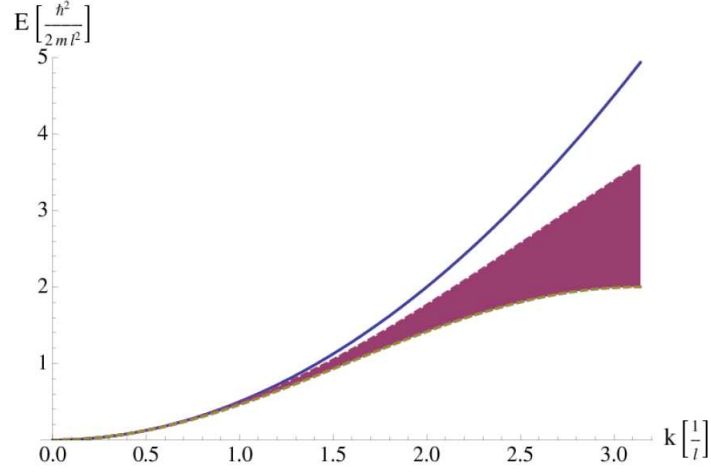
W typowych obliczeniach Monte Carlo wykorzystuje się tylko reprezentację położeniową sieci (funkcje własne operatora położenia $\{\varphi_{\mathbf{r}_i}\}$). W reprezentacji tej bardzo łatwo jest wykonać działanie operatorem pojawiającym się w wyniku wykonania transformacji HS, tj.: $e^{-\Delta\tau\hat{w}_\lambda(\sigma)}\varphi_{\mathbf{r}_i}(\mathbf{r})$, gdyż operator $\hat{w}_\lambda(\sigma)$ zależy tylko od lokalnej gęstości cząstek tzn.: $\hat{w}_\lambda(\sigma) = \sum_i f(\sigma_i)\hat{n}_\lambda(\mathbf{r}_i)$, patrz wzory (3.125) i (3.131). Operacja zatem przyjmuje postać:

$$e^{-\Delta\tau \sum_i f(\sigma_i)\hat{n}_\lambda(\mathbf{r}_i)}\varphi_{\mathbf{r}_i}(\mathbf{r}) = e^{-\Delta\tau f(\sigma_i)}\varphi_{\mathbf{r}_i}(\mathbf{r}). \quad (4.1)$$

Problem natomiast stanowi wykonanie operacji $e^{-\frac{\Delta\tau}{2}\hat{K}}\varphi_{\mathbf{r}_i}(\mathbf{r})$. Standardowo stosowane podejście polega na przybliżeniu operatora różniczkowania występującego w członie kinetycznym za pomocą formuły trójpunktowej:

$$\nabla^2\varphi(x) = \frac{\varphi(x+l) + \varphi(x-l) - 2\varphi(x)}{l^2}. \quad (4.2)$$

Użycie formuły trójpunktowej wprowadza błąd systematyczny do obliczeń, gdyż prowadzi do



Rysunek 4.1: Niebieska linia przedstawia relację dyspersyjną $\varepsilon(\mathbf{p}) = p^2/2m$ dla $p \leq p_{\text{cut}}$. Obszar ograniczony przez linie przerywane przedstawia relację dyspersyjną otrzymaną w wyniku zastosowania formuły trójpunktowej, wzór (4.3). Relacja ta nie jest sferycznie-symetryczna co prowadzi do różnych krzywych, leżących w zakreślonym obszarze, w zależności od kierunku wektora pędu \mathbf{p} . Rysunek z publikacji [39].

relacji dyspersyjnej:

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \frac{1}{ml^2} \left[3 - \cos(p_x l) - \cos(p_y l) - \cos(p_z l) \right]. \quad (4.3)$$

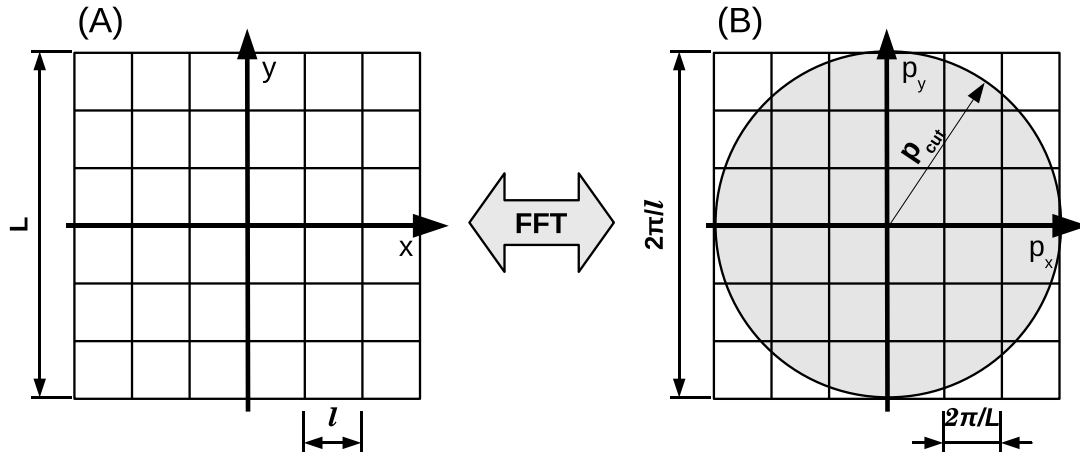
Jest ona dobrym przybliżeniem relacji dyspersyjnej $\varepsilon(\mathbf{p}) = p^2/2m$ tylko dla pędów $p \lesssim p_{\text{cut}}/2$. Co więcej, relacja dyspersyjna (4.3) nie jest sferycznie-symetryczna, patrz rysunek 4.1. W celu wyeliminowania błędu systematycznego, wprowadzanego przez formułę trójpunktową, wykorzystaliśmy dodatkowo sieć odwrotną, czyli reprezentację pędową sieci (funkcje własne operatora pędu $\{\varphi_{\mathbf{p}_k}\}$) [185]. W takim przypadku wykonanie operacji $e^{-\frac{\Delta\tau}{2}\hat{K}}\varphi_{\mathbf{p}_k}(\mathbf{r})$ staje się bardzo proste:

$$e^{-\frac{\Delta\tau}{2}\hat{K}}\varphi_{\mathbf{p}_k}(\mathbf{r}) = \exp\left[-\frac{\Delta\tau}{2} \sum_{\lambda} \left(\frac{\mathbf{p}_k^2}{2m} - \mu\right)\right]\varphi_{\mathbf{p}_k}(\mathbf{r}). \quad (4.4)$$

Rozwiązanie to wprowadza dodatkowy koszt numeryczny, gdyż aby znaleźć elementy macierzowe operatora \mathcal{U} :

$$\langle \varphi_{\mathbf{r}_j} | \mathcal{U}(\{\sigma\}) | \varphi_{\mathbf{r}_i} \rangle = \langle \varphi_{\mathbf{r}_j} | e^{-\frac{\Delta\tau}{2}\hat{K}} e^{-\Delta\tau\hat{w}(\sigma_1)} e^{-\frac{\Delta\tau}{2}\hat{K}} \dots e^{-\frac{\Delta\tau}{2}\hat{K}} e^{-\Delta\tau\hat{w}(\sigma_{N_\tau})} e^{-\frac{\Delta\tau}{2}\hat{K}} | \varphi_{\mathbf{r}_i} \rangle, \quad (4.5)$$

musimy dokonywać wielokrotnej zmiany bazy $\{\varphi_{\mathbf{r}_i}\} \Leftrightarrow \{\varphi_{\mathbf{p}_k}\}$. Do zmiany bazy wykorzystaliśmy darmową bibliotekę FFTW [186]. Dodatkowo, w przestrzeni pędów wprowadziliśmy sferycznie-symetryczny pęd obcięcia, co pozwoliło nam na wykorzystanie metody obliczania



Rysunek 4.2: Schematyczne przedstawienie wykorzystanych sieci. A) reprezentacja położeniowa sieci o stałej sieci l i rozmiarze $L = N_s l$. Sieć ta wykorzystywana jest do wykonania operacji $e^{-\Delta\tau\hat{w}_i(\sigma)}\varphi_{\mathbf{r}_i}(\mathbf{r})$. B) reprezentacja pędowa sieci (sieć odwrotna). Sieć ta wykorzystywana jest do wykonania operacji $e^{-\frac{\Delta\tau}{2}\hat{K}}\varphi_{\mathbf{p}_k}(\mathbf{r})$. Dla uproszczenia analizy wprowadziliśmy sferycznie-symetryczny pęd obcięcia p_{cut} . Zmianę reprezentacji wykonujemy za pomocą szybkiej transformaty Furiera.

parametrów rozpraszania na sieci, opisanej w podrozdziale 3.3. Wykorzystane sieci w sposób schematyczny zostały przedstawione na rysunku 4.2.

Istnienie sieci o skończonym wymiarze skutkuje istnieniem skończonej liczby stanów jednocząstkowych, a co za tym idzie istnieniem maksymalnej ilości cząstek jaką możemy zasymulować w zadanym pudle. Ilość cząstek N dobieramy w taki sposób aby odpowiadający pęd Fermiego $p_F(N) = (3\pi^2 N/V)^{1/3}$ był znacząco mniejszy od obcięcia nadfioletowego oraz znacząco większy od obcięcia podczerwonego tzn.: $p_F(N) \ll p_{\text{cut}}$ oraz $p_F(N) \gg 2\pi/L$. Dodatkowo żądamy aby dla każdej badanej temperatury prawdopodobieństwo obsadzenia stanu jednocząstkowego o pędzie p_{cut} było zaniedbywalnie małe tzn.: $n(p_{\text{cut}}) \approx 0$. W praktycznych zastosowaniach opisane powyżej warunki prowadzą do wniosku, że poprawnie możemy zasymulować układ o liczbie cząstek $N \approx 50$ dla sieci $N_s = 8$ oraz $N \approx 100$ dla sieci $N_s = 10$, w zakresie temperatur $T \lesssim 1.0 \varepsilon_F$. Liczbą cząstek sterujemy poprzez zmianę wartości potencjału chemicznego μ .

4.1.2 Wybór stałych sprzężenia oddziaływania

Zimne gazy atomowe

Do symulacji zimnych gazów atomowych wykorzystano model Hubbarda dany wzorem (3.117). Stałą sprzężenia g_0 dobraliśmy w taki sposób aby poprawnie odtwarzać żadaną długość rozpraszania, wykorzystując zależność (3.110). Masę cząstki przyjęliśmy równą $m = 1u^{-1}$, gdzie u jest jednostką w jakich wyrażamy stałą sieci l . Granicę unitarną zrealizowaliśmy poprzez wybór stałej sprzężenia g_0 w taki sposób aby odpowiadająca jej długość rozpraszania była równa nieskończoności, wzór (3.112). Należy jednak pamiętać, że wskutek istnienia skończonej wartości stałej sieci, generowany jest niezerowy zasięg efektywny, który w tym przypadku wynosi $r_{\text{eff}} = \frac{4}{\pi^2}u \simeq 0.4u$.

Rozrzedzona materia neutronowa

Do symulacji rozrzedzonej materii neutronowej wykorzystano rozszerzony model Hubbarda dany wzorem (3.126), gdzie $g_0 = 6g_1$. Parametry modelu g_1 oraz l dobraliśmy w taki sposób aby poprawnie odtwarzać parametry niskoenergetycznego rozpraszania neutron-neutron w fali s . Długość rozpraszania i zasięg efektywny przyjęliśmy za równe:

$$a = -18.5 \text{ fm}, \quad r_{\text{eff}} = 2.8 \text{ fm}. \quad (4.6)$$

Aby powiązać parametry oddziaływania z parametrami rozpraszania wykorzystaliśmy wzory (3.96) - (3.98) oraz (3.102). Sumowanie szeregu (3.96) wykonaliśmy numerycznie. Masę neutronu przyjęliśmy za równą $m = 939 \text{ MeV}$. W wyniku obliczeń otrzymaliśmy, że parametry modelu wynoszą odpowiednio:

$$g_1 = -0.46 \text{ fm}^2, \quad l = 3.21 \text{ fm}. \quad (4.7)$$

Dla tego zestawu parametrów rozwiązaliśmy numerycznie układ równań (3.130) dla $k = 7$, znajdując w ten sposób wartości pola sigma $\Sigma_k = \{\sigma_1, \dots, \sigma_k\}$, wstępujące w zaproponowanej transformacie HS.

4.1.3 Dokładność wyznaczania wartości oczekiwanych

W przypadku dyskretnej transformacji pole $\{\sigma\}$ jest wektorem o wymiarze $\dim\{\sigma\} = N_\tau \times N_s^3 \times d$, gdzie każda współrzędna przyjmuje wartości z dyskretnego zbioru. Stała $d = 1$ w

przypadku obliczeń dla zimnych gazów atomowych oraz $d = 1 + 6 = 7$ dla rozrzedzonej materii neutronowej (dodatkowy czynnik 6 jest wynikiem uwzględnienia oddziaływania z najbliższymi sąsiadami). Całka wielowymiarowa występująca w wyrażeniu (3.27) staje się sumą wielowymiarową. Jest oczywiste, że sumowania tego nie można wykonać wprost. Sumowanie wykonaliśmy za pomocą metody Monte Carlo z próbkowaniem ważonym. Do generacji punktów z rozkładu $P(\{\sigma\})$ wykorzystaliśmy standardowy algorytm Metropolis'a. W każdym kroku Monte Carlo nowa konfiguracja pola $\{\sigma\}_{n+1}$ była generowana na podstawie bieżącej konfiguracji pola $\{\sigma\}_n$ poprzez zmianę $\varepsilon \cdot \dim\{\sigma\}$ ($\varepsilon \ll 1$) losowo wybranych współrzędnych wektora $\{\sigma\}$, gdzie ε było dynamicznie ustalane w taki sposób, aby otrzymać współczynnik akceptacji $\alpha_{\text{acc}} \approx 0.5$ ¹.

Jako estymator wyniku całkowania, wykorzystaliśmy formułę [155]:

$$\int \mathcal{D}\sigma P(\{\sigma\})f(\{\sigma\}) \approx \bar{f}^{(P)} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(\{\sigma\}_i^{(P)}), \quad (4.8)$$

gdzie N konfiguracji pola $\{\sigma\}_1^{(P)}, \dots, \{\sigma\}_N^{(P)}$ wylosowanych jest z rozkładu $P(\{\sigma\})$, f reprezentuje wyznaczaną wielkość fizyczną. Niepewność oszacowania wartości oczekiwanej rozważanej wielkości fizycznej f wynosi:

$$\Delta f = \sqrt{\frac{R_0^{(f)}(1 + 2 \sum_{k \geq 1} R_k^{(f)})}{N}}, \quad (4.9)$$

gdzie $R_0^{(f)}$ jest wariancją rozważanej wielkości fizycznej f i wynosi:

$$R_0^{(f)} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (f(\{\sigma\}_i^{(P)}) - \bar{f}^{(P)})^2, \quad (4.10)$$

$R_k^{(f)}$ jest współczynnikiem autokorelacji próby rzędu k :

$$R_k^{(f)} = \frac{1}{R_0(N-k)} \sum_{i=1}^{N-k} (f(\{\sigma\}_i^{(P)}) - \bar{f}^{(P)})(f(\{\sigma\}_{i+k}^{(P)}) - \bar{f}^{(P)}). \quad (4.11)$$

Wariancja $R_0^{(f)}$ oraz współczynniki autokorelacji $R_k^{(f)}$ są różne dla różnych wielkości fizycznych f . W celu zredukowania niepewności oszacowania przy obliczaniu wartości średniej wykorzystano tylko co n_{skip} -ty element wygenerowanego za pomocą algorytmu Metropolis'a łańcucha $\{\sigma\}_1^{(P)}, \{\sigma\}_2^{(P)}, \dots$ (tzw. łańcuch Markowa). Zabieg ten zmniejsza autokorelacje R_k występujące we wzorze (4.9). Wartość n_{skip} ustalono dla każdego obliczenia z osobna kierując się

¹Współczynnik akceptacji α_{acc} zdefiniowany jest jako: $\alpha_{\text{acc}} = \frac{N}{M}$, gdzie N jest liczbą wylosowanych próbek, które zostały zaakceptowane przez warunek Metropolis'a, M jest liczbą wszystkich losowań.

kryterium: $R_{n_{\text{skip}}}^{(E_{\text{tot}})} \lesssim 0.1$, gdzie E_{tot} oznacza energię całkowitą. Zauważmy, że taki wybór n_{skip} nie zapewnia, że autokorelacje elementów łańcucha będą małe dla wszystkich pozostałych wielkości fizycznych, wyznaczanych w symulacji Monte Carlo. W praktycznych obliczeniach n_{skip} przyjmowało wartości z zakresu 200 – 600.

Rozmiar próby N , wykorzystany do uśredniania we wzorze (4.8), był wybierany w taki sposób, aby niepewność oszacowania dla każdej badanej wielkości fizycznej była mniejsza niż 5% estymowanej wartości, tzn.:

$$\Delta f / |\bar{f}| \lesssim 0.05. \quad (4.12)$$

W praktycznych obliczeniach wymagało to wygenerowania próby o rozmiarze z przedziału 2000 – 10000.

Poprawne wyznaczenie wartości N_τ jest najtrudniejszym zadaniem. Parametr ten określa wielkość błędu systematycznego wprowadzanego do obliczeń wskutek wykorzystania faktoryzacji Trottera. Błąd ten jest rzędu $O(\Delta\tau^2)$, gdzie $\Delta\tau = \beta/N_\tau$, patrz równanie (3.8). Parametr N_τ ma decydujący wpływ na czas trwania obliczeń Monte Carlo. Zbyt duża wartość tego parametru prowadzi do nieakceptowalnych czasów obliczeń. W praktycznych obliczeniach maksymalna wartość N_τ dla której mogliśmy wykonać obliczenia wynosiła $N_\tau \simeq 2500$.

W celu wyznaczenia „optymalnej” wartości N_τ , lub równoważnego mu parametru $\Delta\tau$, skonstruowaliśmy program numeryczny, który oblicza wartość oczekiwaną dowolnego operatora \hat{O} w sposób dokładny dla przypadku gdy p_{cut} jest wybrane w taki sposób aby sieć odwrotna składała się tylko ze stanów o pędzie $p = 0$ (1 stan) i $p = 2\pi/L$ (6 stanów). Wtedy, odpowiadająca przestrzeń Focka ma wymiar 2^{14} (2^{1+6} dla każdego spinu) i ślady $\text{Tr} \{ \exp[-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})] \}$ oraz $\text{Tr} \{ \hat{O} \exp[-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})] \}$ można obliczyć wprost, znajdując wartości własne i wektory własne hamiltonianu. Wartość parametru N_τ otrzymano żądając aby wynik dokładny $f^{(\text{exact})}$ był zgodny z wynikiem symulacji Monte Carlo dla tak samo utworzonej sieci odwrotnej, w ramach otrzymanej niepewności, tzn.: $f^{(\text{exact})} \in (\bar{f} - \Delta f, \bar{f} + \Delta f)$, dla każdej rozważanej wielkości fizycznej. Dodatkowo żądamy aby zgodność ta była niezależna od liczby próbek Monte Carlo N . Zauważmy, że tego rodzaju sprawdzenie dostarcza dodatkowo bardzo silnego testu na poprawność implementacji algorytmu. Przykładowy wynik testu przedstawia tabela 4.1.

W wyniku licznie przeprowadzonych testów ustaliliśmy, że wartość $\Delta\tau$ powinna wynosić dla modelu Hubbarda (obliczenia dla zimnych gazów atomowych) $\Delta\tau \lesssim 0.01$, natomiast dla rozszerzonego modelu Hubbarda (obliczenia dla rozrzedzonej materii neutronowej) $\Delta\tau \lesssim 0.1$.

Wielkość fizyczna	Wynik dokładny	Wynik Monte Carlo
$\langle \hat{T} \rangle / E_{fg}$	0.31	0.31 ± 0.01
$\langle \hat{V} \rangle / E_{fg}$	-0.084	-0.086 ± 0.003
$\langle \hat{H} \rangle / E_{fg}$	0.23	0.23 ± 0.01
$\langle \hat{N} \rangle$	5.49	5.40 ± 0.17
$n(p = 0)$	0.80	0.79 ± 0.02
$n(p = \frac{2\pi}{L})$	0.32	0.32 ± 0.01
$\int_0^\beta \mathcal{G}^<(p = 0, \tau) d\tau$	11.94	12.01 ± 0.38
$\int_0^\beta \mathcal{G}^<(p = \frac{2\pi}{L}, \tau) d\tau$	13.19	13.15 ± 0.41

Tabela 4.1: Porównanie wyników dokładnych z wynikami Monte Carlo dla przestrzeni pędów ograniczonej do 7 najniższych stanów. Obliczenia wykonano dla rozszerzonego modelu Hubbarda z parametrami danymi przez wzory (4.7). Kolejne wielkości fizyczne to wartość oczekiwana: energii kinetycznej, energii potencjalnej, energii całkowitej, $n(p)$ prawdopodobieństwa obsadzenia stanu o pędzie p , całka z propagatora w czasie urojonym. Obliczenia wykonano dla $T = 0.6 \varepsilon_F$, $\mu = 0.42 \varepsilon_F$, $N_\tau = 373$ ($\Delta\tau = 0.075$), $N_s = 4$. Liczba użytych próbek do uśredniania wynosi $N = 1000$. We wszystkich przypadkach wynik dokładny znajduje się w ramach niepewności oszacowania Monte Carlo.

Łącząc to z informacją, że maksymalna wartość N_τ dla której czasy obliczeń są akceptowalne wynosi $N_\tau \simeq 2500$ otrzymujemy, że minimalne temperatury dla których możliwe było wykonanie w praktyce obliczeń wynoszą $T = 0.1 \varepsilon_F$ dla zimnych gazów atomowych oraz $T = 0.06 \varepsilon_F$ dla rozrzedzonej materii neutronowej.

W przypadku obliczeń dla niskich temperatur w celu zapewnienia zbieżności algorytmu, wymagane było zastosowanie specjalnej procedury mnożenia dużej ilości macierzy. Procedura ta została dokładnie opisana w dodatku 4.3.

4.2 Zimne gazy atomowe

W podrozdziale 1.3 przedstawiono przegląd dotychczas poznanych właściwości fizycznych gazów atomowych, znajdujących się w różnych reżimach. Ze względu na fakt, że gaz atomów znajdujący się w tzw. granicy unitarnej posiada uniwersalne właściwości (patrz podrozdział

1.3.3) naszą uwagę skupiliśmy głównie na tym szczególnym przypadku. Dodatkowo wykonaliśmy obliczenia dla przypadków leżących blisko granicy unitarnej (reżim unitarny), tzn.: $1/p_F a \in (-0.2, 0.2)$. Ograniczenie się tylko do tych przypadków jest uzasadnione gdyż tylko reżim unitarny wymaga wykonania w pełni nieperturbacyjnych obliczeń. W przypadku reżimów BCS i BEC nie jest wymagane wykorzystywanie kosztownej numerycznie metody Monte Carlo, gdyż można skorzystać z przedstawionych w rozdziale 1 metod przybliżonych.

Podsumowując bieżącą wiedzę dotyczącą gazów atomów znajdujących się w reżimie unitarnym, do najważniejszych zbadanych wielkości należą:

1. równanie stanu w funkcji temperatury,
2. entropia w funkcji temperatury,
3. temperatura przejścia fazowego pomiędzy stanem nadciekłym i normalnym.

Wielkości te zostały wyznaczone z zadowalającą dokładnością zarówno eksperymentalnie [54, 57, 187] jak i teoretycznie [34, 35, 39, 188].

Pomimo wielkiego wysiłku włożonego w badania, zarówno od strony teoretycznej jak i eksperymentalnej, wiele fundamentalnych właściwości pozostaje nieznanymi. Właściwości charakteryzujące nadciekłość, takie jak rozmiar szczeliny energetycznej oraz jej ewolucja w funkcji temperatury bez wątplenia można zaliczyć do najważniejszych właściwości, które wymagają zbadania. Z tego powodu, prezentowane wyniki będą dotyczyły głównie tych wielkości. Opracowanie metodologii badań dającej wiarygodne wyniki oraz następnie praktyczne wykonanie badań, które dostarczą odpowiedzi na wyżej postawione pytania stanowią najważniejszy element rozprawy.

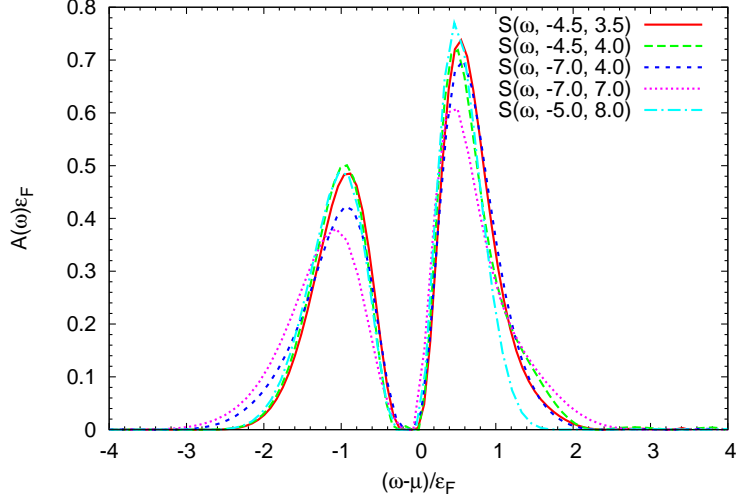
4.2.1 Granica unitarna

W celu zbadania właściwości nadciekłego układu, będącego w granicy unitarnej wyznaczyliśmy zachowanie się szczeliny energetycznej w funkcji temperatury. Szczelinę energetyczną można wyznaczyć na podstawie informacji zawartej w funkcji spektralnej $A(\mathbf{p}, \omega)$. W tym celu za pomocą metody Monte Carlo obliczyliśmy dokładnie temperaturę funkcję Greena $\mathcal{G}^<(\mathbf{p}, \tau_i)$ dla 51 różnych wartości $\tau_i \in [0, \beta]$, $i = 0, 1, \dots, n_\tau = 50$. Obliczenia wykonaliśmy dla temperatur z zakresu $0.10 \varepsilon_F \leq T \leq 0.30 \varepsilon_F$. Zakres ten zawiera temperaturę krytyczną przejścia fazowego, która dla granicy unitarnej wynosi $T_c \approx 0.15 \varepsilon_F$ [35, 39]. W zakresie

tym znajduje się również temperatura $T_0 \simeq 0.23 \varepsilon_F$, poniżej której równanie stanu wykazuje odstępstwo od odpowiednio przesuniętej krzywej, opisującej energię nieoddziałującego gazu Fermiego, patrz podrozdział 1.3. Do obliczeń wykorzystano sieć o rozmiarze $N_s = 8$. Potencjał chemiczny μ dobrano w taki sposób aby otrzymać liczbę cząstek z przedziału 50 – 55. Dla każdej rozważanej temperatury wygenerowaliśmy od 6000 do 10000 próbek, otrzymując niepewność statystyczną oszacowania propagatora mniejszą niż 5%, tzn.: $\Delta\mathcal{G}/\mathcal{G} \lesssim 0.05$. Błąd systematyczny, wynikający z wykorzystania sieci o rozmiarze $N_s = 8$ jak również z faktu, że wykorzystane oddziaływanie nie opisuje w pełni poprawnie granicy unitarnej (zasięg efektywny oddziaływania wynosi $r_{\text{eff}} = 4/\pi p_{\text{cut}} \simeq 0.4u$) został oszacowany na około 10% estymowanych wartości.

Funkcję spektralną $A(\mathbf{p}, \omega)$ obliczyliśmy wykonując przedłużenie analityczne propagatora $\mathcal{G}^<(\mathbf{p}, \tau_i)$ z osi czasów urojonych do czasów rzeczywistych, rozwiązując równanie (3.137). Operację tę wykonaliśmy wykorzystując dwie niezależne metody: podejście oparte o rozkład SVD jądra równania całkowego (patrz podrozdział 3.5.1) oraz metodę maksymalnej entropii (patrz podrozdział 3.5.2). Z uwagi na fakt, że wyznaczenie funkcji spektralnej na podstawie temperaturowej funkcji Greena jest problemem źle postawionym z matematycznego punktu widzenia, wykonaliśmy dokładne sprawdzenie stabilności rozwiązania ze względu na parametry każdego z algorytmów.

W przypadku metody SVD wykorzystaliśmy wariant z uwzględnieniem dodatkowych więzów narzuconych na rozwiązanie, patrz równanie (3.157). Jako dodatkowe więzy wybraliśmy równania (3.133). Wolnymi parametrami algorytmu są parametry a i b określające funkcję wsparcia $S(\omega, a, b)$, równanie (3.156). W wyniku przeprowadzonych badań numerycznych stwierdziliśmy, że zmiana funkcji wsparcia nie zmienia znacząco końcowego wyniku pod warunkiem, że $a < a_{\text{crit}}$ i $b > b_{\text{crit}}$, gdzie a_{crit} i b_{crit} zależą od temperatury T i pędu p . Jest to zrozumiałe, gdyż funkcja wsparcia dostarcza informacji o obszarze gdzie funkcja spektralna jest istotnie różna do zera. Wybór zbyt małych wartości a i b powoduje, że dostarczona informacja *a priori* jest błędna. Aby zniwelować wpływ funkcji wsparcia na końcowy wynik, dla każdego przypadku wykonano obliczenia z 50 losowo wybranymi funkcjami wsparcia, tzw. „próba bootstrap”. Końcowy wynik powstał poprzez uśrednienie wyników cząstkowych. Rysunek 4.3 przedstawia funkcje spektralne otrzymane dla kilku różnych funkcji wsparcia. Obliczenia wykonano dla $T = 0.10 \varepsilon_F$, $p \approx p_F$. Wyraźnie widoczna jest obecność szczeliny energetycznej dla tej temperatury.



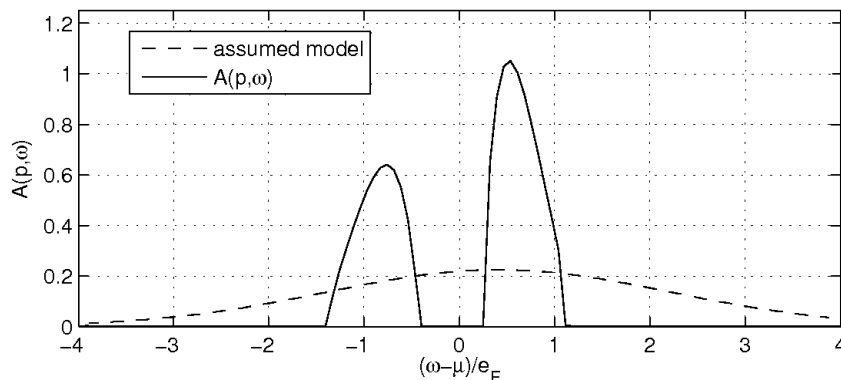
Rysunek 4.3: Przykładowe funkcje spektralne $A(p, \omega)$ otrzymane dla kilku różnych funkcji wsparcia $S(\omega, a, b)$. Obliczenia wykonano dla $T = 0.10 \varepsilon_F$, $p \approx p_F$. Otrzymane wyniki nie wykazują znaczących różnic. We wszystkich przypadkach wyraźnie widoczna jest obecność szczeliny energetycznej tj. funkcja spektralna znika dla $(\omega - \mu)/\varepsilon_F \approx 0$. Wynik końcowy powstaje poprzez uśrednienie wyników cząstkowych.

W przypadku metody maksymalnej entropii, parametrami algorytmu są: model domyślny $\mathcal{M}(\omega)$ oraz parametr α kontrolujący względną wagę pomiędzy informacją *a priori* a informacją pochodzącą z danych, patrz równanie (3.171). Za model domyślny $\mathcal{M}(\omega)$ przyjęliśmy sumę dwóch rozkładów normalnych:

$$\mathcal{M}(\omega) = \frac{1}{c} \left(e^{-\frac{(\omega-\mu-\Delta)^2}{2\sigma^2}} + e^{-\frac{(\omega-\mu+\Delta)^2}{2\sigma^2}} \right), \quad (4.13)$$

gdzie $c = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{M}(\omega) d\omega$, μ i Δ są parametrami określającymi położenie maksimum, σ parametrem określającym szerokość rozkładów normalnych. Wybór modelu domyślnego w takiej formie jest uzasadniony na podstawie wyników otrzymanych za pomocą metody SVD. Zmienne Δ i σ traktowane są jako parametry algorytmu. Zmienna μ dobierana jest w taki sposób aby spełniony był wiąz (3.134). Licznie przeprowadzone testy numeryczne pokazują, że rozwiązanie generowane przez metodę maksymalnej entropii jest stabilne ze względu na wariację modelu domyślnego (tj. parametry Δ i σ) i parametr α przy założeniu, że $\Delta \mathcal{G}^2 \alpha \geq 0.3$. Rysunek 4.4 przedstawia wynik otrzymany za pomocą metody maksymalnej entropii dla przypadku $T = 0.10 \varepsilon_F$, $p \approx p_F$. Otrzymana funkcja spektralna jest bardzo podobna do rozwiązania generowanego przez metodę SVD.

Ostatnim krokiem jest test, polegający na porównaniu rozwiązań generowanego przez obie metody. W celu wyciągnięcia wniosków fizycznych, akceptujemy tylko te rozwiązania, które



Rysunek 4.4: Wynik działania metody maksymalnej entropii. Obliczenia wykonano dla $T = 0.10 \varepsilon_F$, $p \approx p_F$. Linia przerywana przedstawia model domyślny $\mathcal{M}_0(\omega)$. Linia ciągła „samouzgodnioną” funkcję spektralną. Podobnie jak dla metody SVD, wyraźnie widoczna jest obecność szczeliny energetycznej dla tej temperatury.

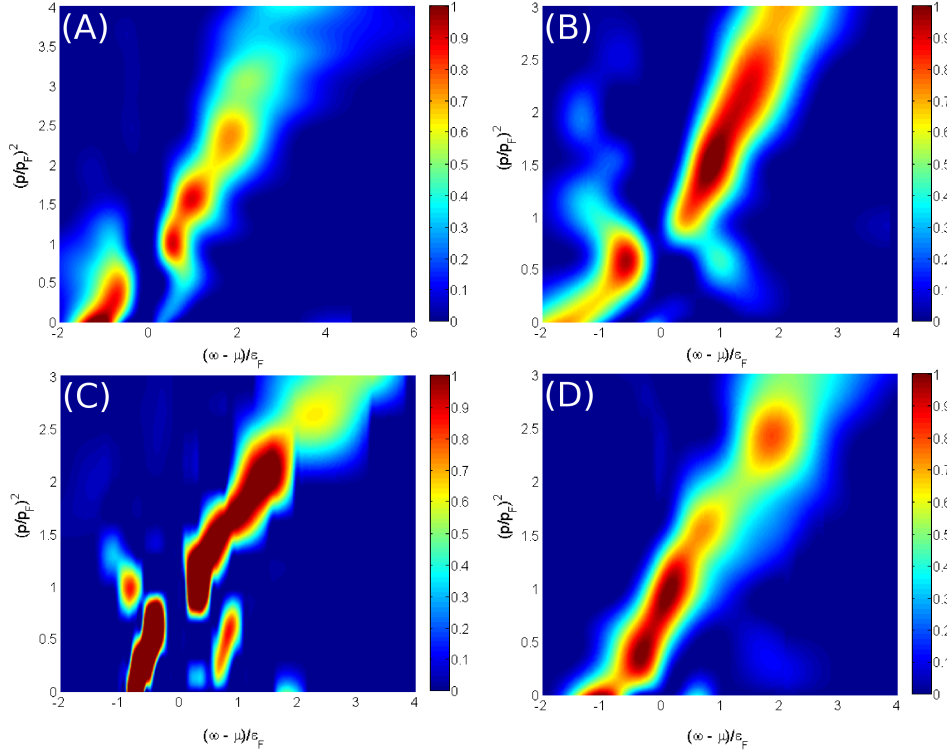
są ze sobą zgodne. Za zgodne rozwiązania uznajemy takie, które:

1. nie różnią się w sposób jakościowy, tzn. porównywane funkcje spektralne posiadają tę samą liczbę maksimów i minimów,
2. maksima i minima porównywanych funkcji spektralnych umiejscowione są w tych samych punktach, tzn. $\omega_{\max/\min}^{(SVD)} \approx \omega_{\max/\min}^{(MaxEnt)}$.

Zadaniem tej procedury jest minimalizacja prawdopodobieństwa znalezienia „fałszywego” rozwiązania.

Rysunek 4.5 przedstawia funkcje spektralne $A(p, \omega)$ dla 4 różnych temperatur: $T = 0.10 \varepsilon_F < T_c$, $T = 0.15 \varepsilon_F \approx T_c$, $T = 0.18 \varepsilon_F > T_c$, $T = 0.20 \varepsilon_F$. Otrzymane wyniki w sposób jednoznaczny wskazują na istnienie szczeliny energetycznej dla temperatur poniżej $T^* \approx 0.20 \varepsilon_F$. Temperatura znikania szczeliny energetycznej T^* jest istotnie wyższa od temperatury przejścia fazowego pomiędzy stanem nadciekłym a normalnym T_c .

Na podstawie funkcji spektralnej możliwe jest wyznaczenie energii wzbudzeń kwazicząstek $E(\mathbf{p})$, utożsamiając je z położeniem maksimum $A(\mathbf{p}, \omega)$ dla ustalonego \mathbf{p} , patrz równanie (3.135). Rysunek 4.6 przedstawia wyznaczone w ten sposób spektrum energii wzbudzeń kwazicząstek dla najmniejszej osiągalnej przez nas temperatury $T = 0.10 \varepsilon_F$. Dla porównania, na tym samym wykresie umieszczono spektrum energii wzbudzeń kwazicząstek obliczone za pomocą metody Monte Carlo zdefiniowanej dla temperatury zera bezwzględnego [45]. Porównanie takie jest uzasadnione, gdyż zależność temperaturowa różnych wielkości fizycznych



Rysunek 4.5: Funkcja spektralna $A(p, \omega)$ dla czterech różnych temperatur: A) $T = 0.10 \varepsilon_F < T_c$, B) $T = 0.15 \varepsilon_F \approx T_c$, C) $T = 0.18 \varepsilon_F > T_c$, D) $T = 0.20 \varepsilon_F$. Istnienie szczeliny energetycznej jest wyraźnie widoczne dla temperatur $T < 0.20 \varepsilon_F$.

jest słaba dla $T < T_c$, co zostanie pokazane w dalszej części. Autorzy, J. Carlson i S. Reddy, do wyznaczenia energii wzbudzeń kwazicząstek wykorzystali całkowicie odmienne podejście. Energie wzbudzeń $E(\mathbf{p})$ zostały wyznaczone dla ustalonej gęstości za pomocą formuły:

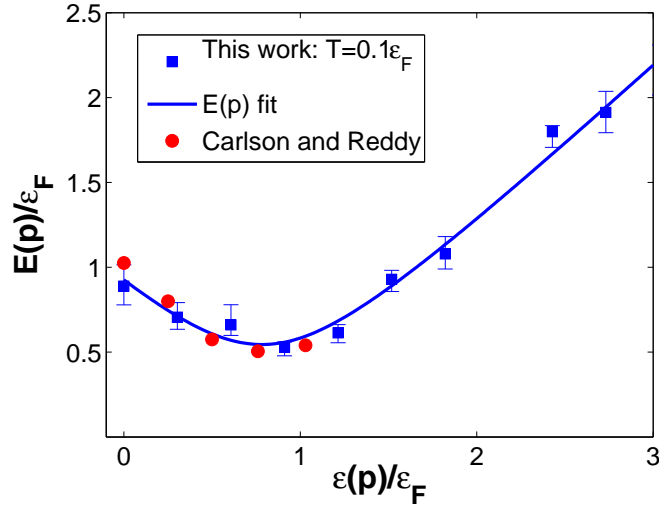
$$E(\mathbf{p}) = E_{\mathbf{p}}(N + 1) - \frac{1}{2}[E_0(N) + E_0(N + 2)], \quad (4.14)$$

gdzie N jest parzyste. $E_{\mathbf{p}}(N + 1)$ jest energią układu o $N + 1$ cząstkach, gdzie N cząstek tworzy pary Coopera oraz pozostała cząstka znajduje się w stanie o pędzie \mathbf{p} . $E_0(N)$ i $E_0(N + 2)$ są odpowiednio energiami stanu podstawowego składającego się z N i $N + 2$ cząstek. Bardzo dobra zgodność otrzymanych wyników potwierdza poprawność naszego podejścia.

Dokładna analiza otrzymanych energii wzbudzeń kwazicząstek prowadzi do wniosku, że wszystkie badane przypadki mogą zostać bardzo dobrze opisane za pomocą znanej z teorii BCS formuły:

$$E(\mathbf{p}) = \pm \sqrt{\left(\frac{p^2}{2m^*} + U - \mu\right)^2 + \Delta^2}, \quad (4.15)$$

gdzie m^* jest masą efektywną, U średnim potencjałem jednocząstkowym, Δ szczeliną ener-

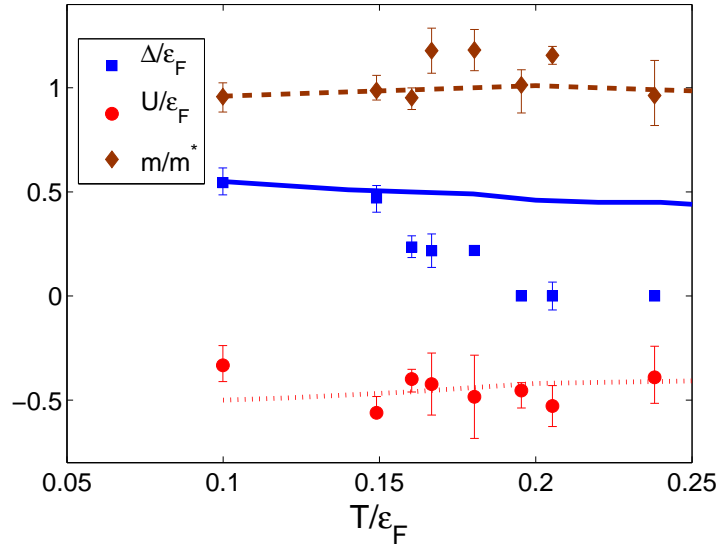


Rysunek 4.6: Energie wzbudzeń kwazicząstek $E(\mathbf{p})$ otrzymane na podstawie funkcji spektralnej $A(\mathbf{p}, \omega)$ dla najniższej osiągalnej przez nas temperatury $T = 0.10 \varepsilon_F$ (niebieskie kwadraty), ε_F jest energią Fermiego, $\varepsilon(\mathbf{p}) = \frac{p^2}{2m} - \mu$. Dla porównania na wykresie umieszczono spektrum wzbudzeń kwazicząstek obliczone za pomocą metody Monte Carlo przez J. Carlson i S. Reddy (czerwone koła) [45]. Doskonała zgodność z wynikami dla $T = 0$ potwierdza poprawność naszego podejścia. Linia (niebieska) przedstawia wynik dopasowania relacji dyspersyjnej typu BCS, danej równaniem (4.15), ze względu na parametry m^* , U , Δ . Relacja typu BCS jest w stanie poprawnie odtworzyć spektrum kwazicząstek dla każdej rozważanej przez nas temperatury.

Parametry m^* , U , Δ są funkcjami temperatury. Na rysunku 4.6 przedstawiono za pomocą linii wynik dopasowania równania (4.15) do otrzymanych energii wzbudzeń kwazicząstek, ze względu na parametry m^* , U , Δ .

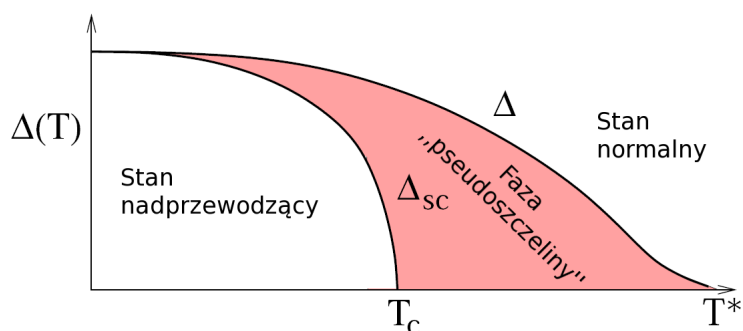
Rysunek 4.7 przedstawia parametry spektrum jednocząstkowego m^* , U , Δ w funkcji temperatury. Masa efektywna m^* oraz potencjał jednocząstkowy U nie wykazują istotnej zależności w funkcji temperatury, dla zakresu temperatur przez nas zbadanych. Otrzymana masa efektywna nie jest istotnie różna od „gołej” masy cząstki, co nie jest wynikiem zaskakującym z uwagi na fakt, że zasięg efektywny oddziaływania jest pomijalny.

Najbardziej zaskakujące zachowanie w funkcji temperatury wykazuje szczelina energetyczna $\Delta(T)$. Zgodnie z teorią BCS szczelina energetyczna powinna zniknąć w temperaturze krytycznej przejścia fazowego, która w tym przypadku wynosi $T_c = 0.15 \varepsilon_F$. Nasze wyniki wskazują jednoznacznie, że szczelina energetyczna nadal istnieje powyżej temperatury kry-



Rysunek 4.7: Parametry spektrum jednocząstkowego m^* (romby), U (koła), Δ (kwadraty) w funkcji temperatury, obliczone na podstawie otrzymanych funkcji spektralnych. Masa efektywna m^* oraz potencjał jednocząstkowy U nie wykazują istotnej zależności od temperatury. Otrzymane wyniki dla szczeliny energetycznej jednoznacznie wskazują, że istnieje ona powyżej temperatury krytycznej ($T_c = 0.15 \varepsilon_F$), aż do temperatury $T^* \approx 0.20 \varepsilon_F$. Linie: ciągła, kreskowana i kropkowana odpowiadają kolejno: szczelinie energetycznej, masie efektywnej i potencjałowi jednocząstkowemu wyznaczonym przy założeniu, że układ można opisać za pomocą modelu niezależnych kwazicząstek, patrz równanie (4.17). Model taki poprawnie odzwierciedla parametry spektrum jednocząstkowego dla temperatur $T \leq T_c$.

tycznej, co najmniej do temperatury $T^* \approx 0.20 \varepsilon_F$ [189]. Nie oznacza to jednakże, że powyżej T^* szczelina energetyczna znika. Dla temperatur z przedziału $T^* \lesssim T \lesssim 0.25 \varepsilon_F$, w zależności od ustawień algorytmu SVD, można otrzymać funkcję spektralną, posiadającą szczelinę energetyczną (rozwiązanie w postaci rozkładu dwumodalnego) jak również nie posiadającą szczeliny energetycznej (rozwiązanie w postaci rozkładu jednomodalnego). Wynika to z faktu, że wartości propagatora są obciążone skończonymi niepewnościami statystycznymi, które nie pozwalają nam na wyznaczenie subtelnych szczegółów rozwiązania $A(\mathbf{p}, \omega)$. Z przeprowadzonych testów numerycznych wynika, że przy otrzymanej przez nas dokładności oszacowania $\Delta\mathcal{G}$ minimalna wartość szczeliny energetycznej, którą możemy w sposób jednoznaczny zidentyfikować wynosi $\Delta_{\min} \approx 0.2 \dots 0.3 \varepsilon_F$. Zatem rozsądnym wydaje się założyć, że szczelina energetyczna znika dla temperatury charakterystycznej $T_0 \approx 0.23 \varepsilon_F$. Założenie takie nada-



Rysunek 4.8: Typowa ewolucja szczeliny energetycznej $\Delta(T)$ w funkcji temperatury dla nadprzewodników wysokotemperaturowych. Poniżej temperatury krytycznej T_c układ znajduje się w stanie nadprzewodzącym. Pomiędzy temperaturami T_c i T^* układ nie jest nadprzewodzący, chociaż nadal istnieją pary Coopera, tzw. faza „pseudoszczeliny”. Powyżej temperatury T^* pary Coopera przestają istnieć i układ przechodzi do stanu normalnego. Δ_{sc} jest parametrem porządku opisującym nadprzewodnictwo. Teoria BCS zakłada, że $\Delta(T) = \Delta_{sc}(T)$.

je wyraźne znaczenie temperaturze charakterystycznej T_0 , której sens fizyczny jak dotąd był nieznany. W przeciwnym razie będziemy zmuszeni zaakceptować istnienie trzeciej charakterystycznej temperatury (w której znika przerwa energetyczna), co będzie prowadziło do bardzo dziwnej i niespotykanej w fizyce sytuacji.

Otrzymane wyniki wykazują duże podobieństwo do wyników otrzymywanych w przypadku badań nadprzewodnictwa wysokotemperaturowego, gdzie również obserwuje się istnienie szczeliny energetycznej powyżej temperatury przejścia fazowego. Zwyczajowo szczelinę energetyczną powyżej T_c określa się mianem „pseudoszczeliny” [190, 191]. Typową ewolucję szczeliny energetycznej $\Delta(T)$ w funkcji temperatury dla nadprzewodników wysokotemperaturowych przedstawia rysunek 4.8. Należy dodać, że aktualnie nie istnieje teoria, która w sposób zadowalający wyjaśniałaby zjawisko nadprzewodnictwa wysokotemperaturowego [28, 192, 193, 194].

Bieżąca wiedza dotycząca fizyki nadprzewodnictwa wysokotemperaturowego już od kilku lat skłaniała pewne grupy fizyków do wniosku, że zimny gaz atomów znajdujący się w granicy unitarnej może być kolejnym przykładem układu, gdzie występuje faza „pseudoszczeliny” [28, 117, 195, 196, 197, 198]. Dotychczas podjęte próby eksperymentalnego zbadania szczeliny energetycznej i jej ewolucji w funkcji temperatury, za pomocą technik spektroskopii radiowej, nie dostarczyły jednoznacznych wyników potwierdzających tą hipot-

		$\Delta(T = 0)/\varepsilon_F$
Teoria (QMC)	Carlson <i>et al.</i> , [30]	0.54
	Chang <i>et al.</i> , [31]	0.59(2)
	Carlson, Reddy [45]	0.50(2)
	Gezerlis, Carlson [46]	0.50(3)
	Bulgac <i>et al.</i> , [39]	0.55
	Magierski <i>et al.</i> , [189]	0.55(4)
Dane eksperymentalne + model teoretyczny	Carlson, Reddy [43]	0.45(5)
	Schirotzek <i>et al.</i> , [44]	0.44

Tabela 4.2: Porównanie oszacowań szczeliny energetycznej dla temperatury zera bezwzględnego. Dla obliczeń teoretycznych podano tylko wyniki otrzymane metodą Kwantowego Monte Carlo (QMC).

tezę [199, 200, 201, 202]. Początkowa interpretacja otrzymanych danych wskazywała na istnienie „pseudoszczeliny” w zbadanych układach [203, 204]. Jednak późniejsze badania wykazały, że podane interpretacje są niewiarygodne z powodu błędnie przyjętych założeń [205, 206, 207, 208, 209, 210]. Aktualnie rozważa się wykorzystanie spektroskopii Bragga w celu otrzymania bardziej jednoznacznych danych eksperymentalnych [211].

Z powodu braku wiarygodnych technik, zarówno teoretycznych jak i eksperymentalnych, dotychczasowe badania ograniczały się jedynie do wyznaczenia szczeliny energetycznej dla temperatury zera bezwzględnego $\Delta_0 = \Delta(T = 0)$. Ekstrapolacja naszych wyników do temperatury zera bezwzględnego daje wartość $\Delta_0 = 0.55(4) \varepsilon_F$. Wartość ta jest konsystentna z wynikami innych grup wykorzystujących techniki Monte Carlo [30, 31, 39, 45, 46]. Podjęto również próby wyznaczenia szczeliny energetycznej Δ_0 na podstawie istniejących danych doświadczalnych. Wartość wyznaczona na podstawie danych eksperymentalnych jest trochę niższa od przewidywań teoretycznych, $\Delta_0^{\text{exp}} \approx 0.45 \varepsilon_F$ [43, 44]. Należy jednak dodać, że aktualnie szczelina energetyczna Δ_0 nie jest wielkością, którą można zmierzyć bezpośrednio. Z tego powodu, w trakcie wyznaczania Δ_0^{exp} zakładany jest pewien model teoretyczny, który może być przyczyną obserwowanej rozbieżności. Porównanie aktualnie dostępnych wyników przedstawia tabela 4.2. Warto dodać, że gaz atomów znajdujący się w granicy unitarnej jest układem który posiada największą szczelinę energetyczną (mierzona w jednostkach energii Fermiego) ze wszystkich poznanych dotychczas układów fizycznych, $\Delta_0 \approx 0.5 \varepsilon_F$!

Bardzo ciekawy wniosek otrzymujemy zauważając, że dla gazu atomów będącego w granicy unitarnej, stosunek $\Delta_0/T_c \approx 3.66$ jest ponad dwukrotnie większy niż przewiduje to teoria BCS (dla teorii BCS: $\Delta_0^{(BCS)}/T_c \approx 1.76$, patrz równanie (1.8)). Łącząc to z faktem istnienia „pseudoszczeliny” oraz wynikami otrzymanymi we wcześniejszych pracach (zobacz np. [34]) wnioskujemy, że gaz cząstek znajdujących się w granicy unitarnej nie jest nadprzewodnikiem typu BCS, lecz należy go uznać za nowy rodzaj nadprzewodnika o właściwościach bardzo podobnych do nadprzewodników wysokotemperaturowych.

Zaskakującym jest, że wyznaczone spektrum wzbudzeń kwazicząstek na podstawie dokładnej funkcji spektralnej, można poprawnie odtworzyć dla temperatur poniżej temperatury krytycznej $T \leq T_c$, jeśli założymy, że system składa się z niezależnych kwazicząstek (założenie to stanowi istotę teorii BCS). Przy takim założeniu funkcja spektralna przyjmuje bardzo prostą postać: $A_{qp}(\mathbf{p}, \omega) = 2\pi\delta(\omega - E(\mathbf{p}))$, patrz wzór (3.135). Temperaturowa funkcja Greena w takim modelu redukuje się do postaci:

$$\mathcal{G}^<(\mathbf{p}, \tau) = -\frac{e^{-\tau E(\mathbf{p})}}{1 + e^{-\beta E(\mathbf{p})}}. \quad (4.16)$$

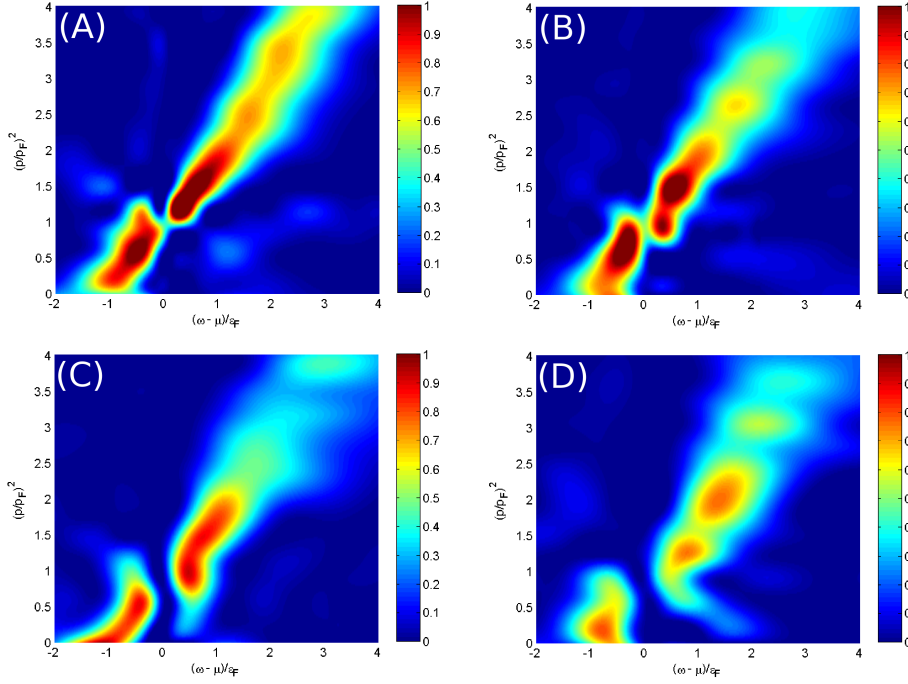
Aby wyznaczyć energie wzbudzeń $E(\mathbf{p})$ wykorzystaliśmy statyczną funkcję odpowiedzi $\chi(\mathbf{p})$, która w tym przypadku może zostać łatwo obliczona:

$$\chi(\mathbf{p}) = -\int_0^\beta d\tau \mathcal{G}^<(\mathbf{p}, \tau) = \frac{1}{E(\mathbf{p})} \frac{e^{\beta E(\mathbf{p})} - 1}{e^{\beta E(\mathbf{p})} + 1}. \quad (4.17)$$

Zatem, na podstawie obliczonej temperaturowej funkcji Greena (w ramach rachunku Monte Carlo) można obliczyć funkcję odpowiedzi $\chi(\mathbf{p})$. Następnie rozwikłując równanie (4.17) dla każdego pędu \mathbf{p} , otrzymujemy spektrum wzbudzeń kwazicząstek $E(\mathbf{p})$. Otrzymane w ten sposób spektrum energii $E(\mathbf{p})$ okazuje się być bardzo dobrze parametryzowane za pomocą relacji dyspersyjnej typu BCS danej równaniem (4.15), dla wszystkich rozważanych temperatur. Wyznaczone parametry m^* , U i Δ , poprzez dopasowanie relacji typu BCS, zostały zaznaczone na rysunku 4.7 za pomocą linii. Widoczne jest, że potencjał jednocząstkowy U i masa efektywna m^* są dobrze odtwarzane za pomocą tego podejścia w całym rozważanym przedziale temperatur. Szczelina energetyczna jest natomiast poprawnie odtwarzana tylko dla temperatur niższych od temperatury przejścia fazowego T_c .

4.2.2 Reżim unitarny

Obliczenia numeryczne dla reżimu unitarnego wykonaliśmy w podobny sposób jak dla granicy unitarnej, patrz poprzedni podrozdział. Funkcje spektralne zostały zrekonstruowane za pomocą

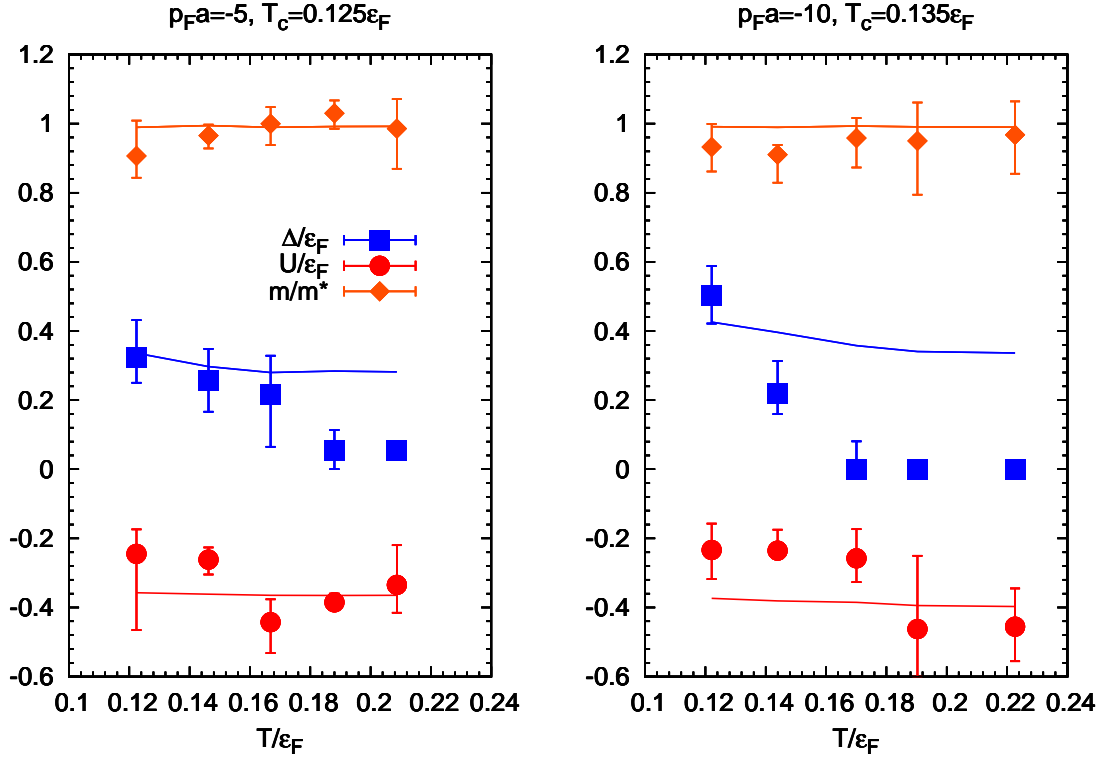


Rysunek 4.9: Funkcja spektralna dla $T \approx T_c$, A) $1/p_{Fa} \approx -0.2$ ($T_c \approx 0.12 \varepsilon_F$), B) $1/p_{Fa} \approx -0.1$ ($T_c \approx 0.13 \varepsilon_F$), C) $1/p_{Fa} \approx 0.1$ ($T_c \approx 0.17 \varepsilon_F$), D) $1/p_{Fa} \approx 0.2$, ($T_c \approx 0.19 \varepsilon_F$). We wszystkich przypadkach widoczne jest istnienie szczeliny energetycznej w temperaturze krytycznej T_c .

metody SVD (z wyjątkiem kilku wybranych przypadków, gdzie dodatkowo wykorzystano metodę MaxEnt, w celu sprawdzenia zgodności wyników). Ewolucja szczeliny energetycznej w funkcji temperatury została zbadana dla stałych sprężenia z obszaru $-0.2 \leq 1/p_{Fa} \leq 0.2$. Zakres badanych temperatur wybrano w taki sposób aby zawarte w nim były: temperatura przejścia fazowego T_c oraz temperatura charakterystyczna T_0 .

Dla stałych sprężenia $1/p_{Fa} < -0.2$ (strona BCS) poprawne wyznaczenie funkcji spektralnej poprzez wykonanie przedłużenia analitycznego staje się niemożliwe. Wynika to z faktu, że gdy coraz bardziej zbliżamy się do reżimu BCS ($1/p_{Fa} \rightarrow -\infty$) szczelina energetyczna staje się coraz mniejsza, natomiast metody SVD i maksymalnej entropii mają skończoną rozdzielczość. Według naszych badań nie można za ich pomocą poprawnie zrekonstruować funkcji spektralnej ze szczeliną energetyczną mniejszą niż $\Delta_{\min} \approx 0.2 \varepsilon_F$. Dodatkowo badania utrudnia fakt, że również temperatura krytyczna staje się coraz mniejsza, patrz rysunek 1.4. Z tego powodu obliczenia należy wykonywać dla coraz niższych temperatur co prowadzi do bardzo długich czasów obliczeń.

Obliczenia dla dodatnich długości rozpraszania (strona BEC) ograniczone są przez skoń-

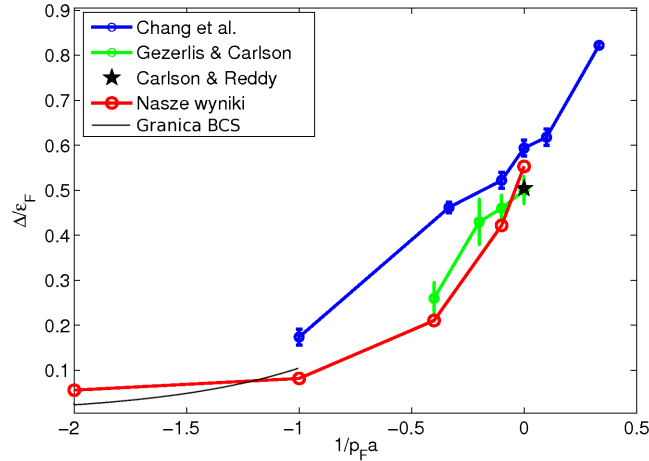


Rysunek 4.10: Parametry spektrum jednocząstkowego m^* (romby), U (koła), Δ (kwadraty) w funkcji temperatury, dla stałych sprężenia gdzie $1/p_F a < 0$ (strona BCS). Masa efektywna m^* oraz potencjał jednocząstkowy U nie wykazują istotnej zależności od temperatury. Otrzymane wyniki dla szczeliny energetycznej wskazują, że istnieje ona powyżej temperatury krytycznej. Linie: niebieska, brązowa, czerwona, odpowiadają kolejno: szczelinie energetycznej, masie efektywnej i potencjałowi jednocząstkowemu wyznaczonym przy założeniu, że układ można opisać za pomocą modelu nieoddziałujących kwazicząstek, patrz równanie (4.17).

czoną wartość stałej sieci l . Dla stałych sprężenia gdzie $1/p_F a > 0.2$ sieć staje się niewystarczająca aby poprawnie opisać stany związane (dimery), których rozmiar staje się porównywalny ze stałą sieci.

We wszystkich zbadanych przypadkach dla stałych sprężenia z przedziału $-0.2 \leq 1/p_F a \leq 0.2$ stwierdziliśmy istnienie obszaru „pseudoszczeliny” powyżej temperatury krytycznej T_c . Rysunek 4.9 przedstawia otrzymane funkcje spektralne dla temperatury krytycznej, dla kilku wybranych stałych sprężenia.

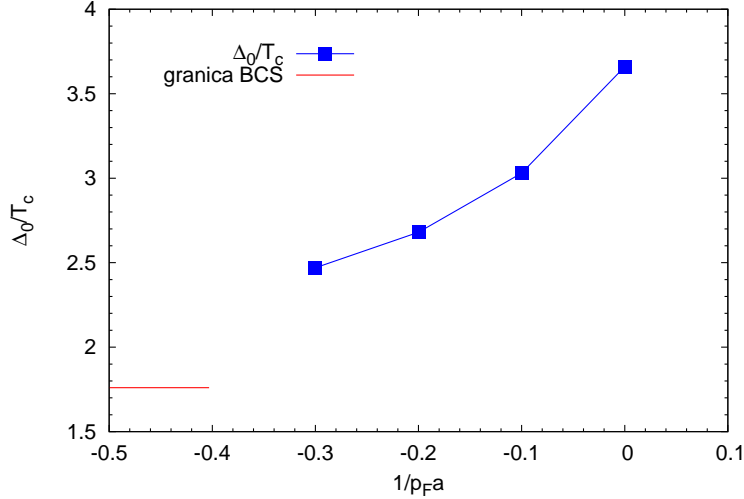
Dla stałych sprężenia gdzie $1/p_F a < 0$ (strona BCS) znaleźliśmy, że otrzymane na podstawie funkcji spektralnej spektrum wzbudzeń kwazicząstek można bardzo dobrze opisać za pomocą formuły typu BCS, równanie (4.15). Ponadto, podobnie jak miało to miejsce dla



Rysunek 4.11: Zależność szczeliny energetycznej, dla najniższych osiągniętych przez nas temperatur ($T \lesssim 0.1 \varepsilon_F$), w funkcji stałej sprzężenia. Dla porównania umieszczono również wyniki innych obliczeń Monte Carlo, otrzymanych dla temperatury zera bezwzględnego: Chang *et al.*, [31], Gezerlis & Carlson [46], Carlson & Reddy [45]. Linia z lewej strony (granica BCS) przedstawia przewidywania teorii BCS, równanie (1.8).

granicy unitarnej, dla temperatur poniżej temperatury krytycznej T_c parametry spektrum jednocząstkowego (m^* , U , Δ) można z dobrą dokładnością odtworzyć zakładając, że układ składa się z nieoddziałujących kwazicząstek, patrz równania (4.16) i (4.17). Rysunek 4.10 przedstawia parametry spektrum jednocząstkowego w funkcji temperatury dla dwóch wybranych stałych sprzężenia.

W celu wyznaczenia wartości szczeliny energetycznej Δ_0 dla $T \rightarrow 0$ wykorzystaliśmy spostrzeżenie, że „model niezależnych kwazicząstek” dobrze odtwarza tę wielkość w niskich temperaturach, tj. $T < T_c$. W przeciwieństwie do metody opartej na funkcji spektralnej, w podejściu tym nie występuje problem skończonej rozdzielczości (nie rozwiązujemy równania, które z matematycznego punktu widzenia jest źle postawione). Z tego powodu, możliwe jest wykonanie obliczeń dla szerszego zakresu stałych sprzężenia. Założenie, że wspomniany powyżej model będzie również poprawnie odtwarzał parametry spektrum jednocząstkowego dla stałych sprzężenia $1/p_{Fa} < -0.2$ jest uzasadnione, gdyż wiadome jest, że przybliżenie niezależnych kwazicząstek pracuje dobrze dla reżimu BCS. Rysunek 4.11 przedstawia zależność szczeliny energetycznej, dla najniższych osiągniętych przez nas temperatur ($T \lesssim 0.1 \varepsilon_F$), w funkcji stałej sprzężenia. Jak należało się spodziewać, wraz ze zbliżaniem się do reżimu BCS ($1/p_{Fa} \rightarrow -\infty$) szczelina energetyczna staje się coraz bliższa przewidywaniu teorii BCS,



Rysunek 4.12: Zależność stosunku szczeliny energetycznej do temperatury krytycznej przejścia fazowego Δ_0/T_c w funkcji stałej sprzężenia (niebieskie kwadraty). Czerwona linia z lewej strony przedstawia przewidywanie teorii BCS, $\Delta_0^{(BCS)}/T_c \simeq 1.76$.

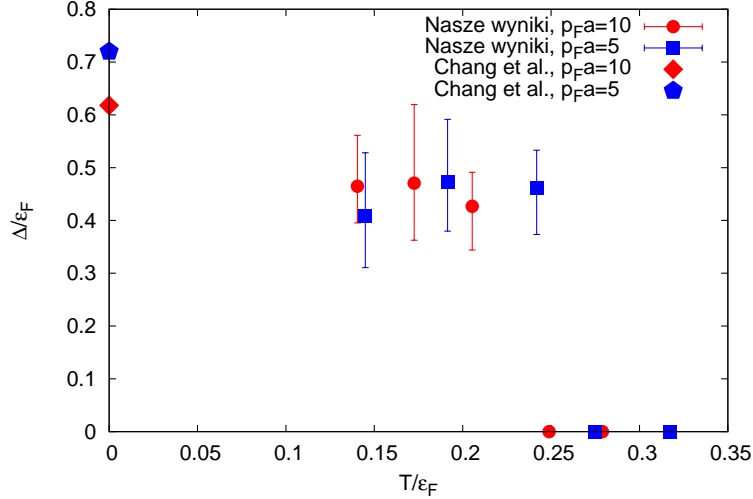
równanie (1.8). Dla porównania na wykresie umieszczono również wyniki innych obliczeń Monte Carlo, otrzymanych dla temperatury zera bezwzględnego.

Warto również dodać, że dla dużych wartości długości rozpraszania (co do modułu) stosunek szczeliny energetycznej do temperatury krytycznej przejścia fazowego Δ_0/T_c jest istotnie większy od wartości przewidywanej przez teorię BCS, $\Delta_0^{(BCS)}/T_c \simeq 1.76$. Wraz ze zbliżaniem się do reżimu BCS, wartość stosunku szczeliny energetycznej do temperatury krytycznej staje się coraz mniejsza, dążąc do wyniku BCS. Rysunek 4.12 przedstawia wartość Δ_0/T_c dla stałych sprzężenia z przedziału $1/p_F a \in [-0.3, 0.0]$.

Dla stałych sprzężenia, gdzie $1/p_F a > 0$ (strona BEC) zauważyliśmy, że otrzymanych energii wzbudzeń kwazicząstek nie można poprawnie opisać za pomocą relacji dyspersyjnej typu BCS. Jest to zrozumiałe, gdyż w układzie zaczynają się pojawiać stany związane (bozonowe stopnie swobody). W konsekwencji wzbudzenia elementarne typu bozonowego (fonony Bogoliubowa-Andersona), z liniową relacją dyspersyjną $\omega(\mathbf{p}) = c_s \mathbf{p}$, stają się coraz bardziej istotne. Z tego powodu, nie można określić parametrów spektrum jednocząstkowego poprzez wykonanie dopasowania energii wzbudzeń do wzoru (4.15). Nadal jednak możliwe jest wyznaczenie zależności szczeliny energetycznej w funkcji temperatury, korzystając z przepisu:

$$\Delta = \min_{\mathbf{p}}[|E(\mathbf{p})|], \quad (4.18)$$

gdzie $E(\mathbf{p})$ są energiami wzbudzeń otrzymanymi na podstawie funkcji spektralnej.

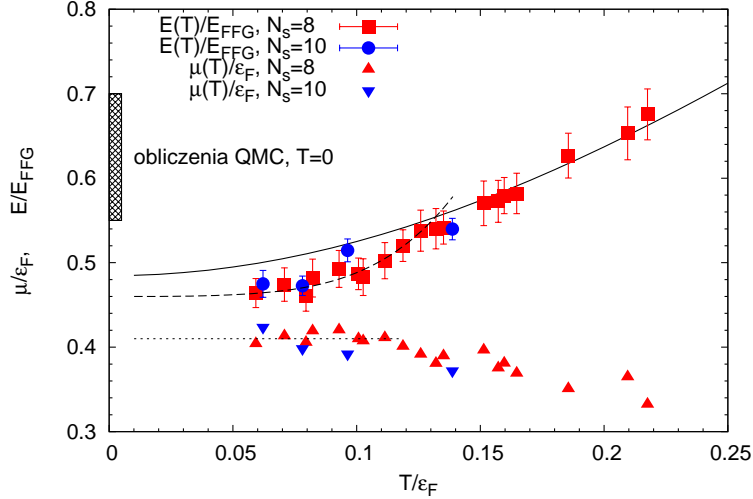


Rysunek 4.13: Ewolucja szczeliny energetycznej dla dwóch wybranych stałych sprzężenia: $p_{Fa} = 10$ (koła) i $p_{Fa} = 5$ (kwadraty). Temperatura przejścia fazowego pomiędzy stanem normalnym i nadciekłym dla tych układów wynosi odpowiednio: $T_c \simeq 0.17 \varepsilon_F$ i $T_c \simeq 0.19 \varepsilon_F$ [39]. Wyraźnie widoczne jest istnienie szczeliny energetycznej powyżej temperatury krytycznej T_c . Szczelina energetyczna utrzymuje się aż do temperatury $T^* \approx 0.25 \varepsilon_F$. Dodatkowo na wykresie umieszczono wyniki obliczeń Monte Carlo, otrzymanych dla temperatury zera bezwzględnego, Chang *et al.* [31].

Rysunek 4.13 przedstawia ewolucję szczeliny energetycznej dla dwóch wybranych stałych sprzężenia: $1/p_{Fa} = 0.1$ i $1/p_{Fa} = 0.2$. Dla układów tych temperatury przejścia fazowego pomiędzy stanem normalnym i nadciekłym wynoszą odpowiednio: $T_c \simeq 0.17 \varepsilon_F$ i $T_c \simeq 0.19 \varepsilon_F$ [39]. W obu przypadkach wyraźnie widoczne jest istnienie szczeliny energetycznej powyżej temperatury krytycznej. Szczelina energetyczna utrzymuje się aż do temperatury $T^* \approx 0.25 \varepsilon_F$. Temperatura ta jest bardzo bliska temperaturze charakterystycznej $T_0 \simeq 0.26 \varepsilon_F$, poniżej której równanie stanu wykazuje odstępstwo od odpowiednio przesuniętej krzywej, opisującej energię nieoddziałującego gazu Fermiego, patrz rysunek 1.4. Potwierdza to naszą hipotezę, wysuniętą w poprzednim podrozdziale, że temperaturę charakterystyczną T_0 należy uznać za temperaturę powyżej której pary Coopera przestają istnieć.

4.3 Materia neutronowa

Obliczenia dla rozrzedzonej materii neutronowej wykonaliśmy wykorzystując sieci $N_s = 6, 8, 10$. Liczbę cząstek wybraliśmy w taki sposób aby otrzymać gęstość $\rho = 0.02 \rho_0$, co od-



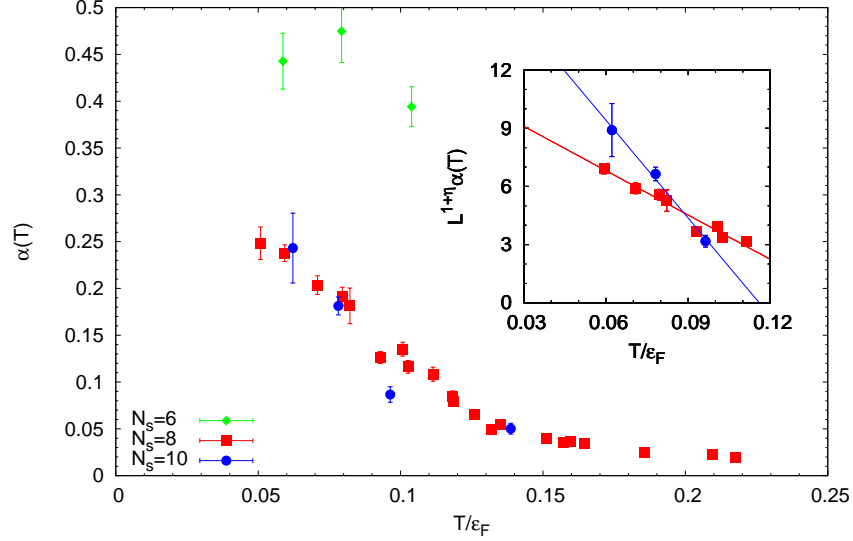
Rysunek 4.14: Energia całkowita E i potencjał chemiczny μ w funkcji temperatury dla rozrzedzonej materii neutronowej o gęstości $p_F \approx 0.45 \text{ fm}^{-1}$ ($\rho = 0.02\rho_0$). Kwadraty i koła przedstawiają odpowiednio wyniki otrzymane dla sieci o rozmiarach $N_s = 8$ i $N_s = 10$. Trójkąty i odwrócone trójkąty, wskazują wartości potencjału chemicznego w funkcji temperatury dla sieci $N_s = 8$ i $N_s = 10$. Linia ciągła przedstawia równanie stanu dla nieoddziałującego gazu Fermiego o gęstości $p_F \approx 0.45 \text{ fm}^{-1}$, przesunięte o stałą wartość $\xi_s = 0.52 E_{fg}$. Równanie to poprawnie odtwarza dane dla temperatur $T > 0.14 \epsilon_F$. Linie kreskowana i kropkowana przedstawiają ekstrapolację danych do temperatury zera bezwzględnego $T = 0$, odpowiednio dla energii i potencjału chemicznego. Kreskowany obszar przedstawia przedział, w którym znajdują się wyniki dostępnych obliczeń Monte Carlo dla rozważanej gęstości, dla temperatury zera bezwzględnego.

powiada pędowi Fermiego $p_F \approx 0.45 \text{ fm}^{-1}$ (90 MeV). Dla wybranej gęstości zarówno długość rozpraszania jak i zasięg efektywny stają się istotnymi skalami problemu, gdyż $|p_F a| \approx 8.3 \gg 1$ oraz $p_{F\text{eff}} \approx 1.3 \gtrsim 1$. Z drugiej strony, gęstość jest na tyle mała, że wkłady do oddziaływania neutron-neutron pochodzące od wyższych fal parcjalnych niż fala s , jak i wkłady związane z siłami trójciałowymi są pomijalne w porównaniu z otrzymaną przez nas dokładnością obliczeń [63, 64, 65]. Parametry oddziaływania zostały wybrane tak jak zostało to opisane w podrozdziale 4.1.2. Obliczenia zostały wykonane dla temperatur z zakresu od $0.06 \epsilon_F$ (0.26 MeV) do $1.0 \epsilon_F$ (4.3 MeV). Liczba próbek Monte Carlo została dobrana w taki sposób aby błąd względny był mniejszy niż 5% dla wszystkich rozważanych wielkości. Dla wszystkich zbadanych temperatur otrzymane prawdopodobieństwo obsadzenia stanu o najwyższym dostępnym pędzie było poniżej 1%.

Rysunek 4.14 przedstawia zachowanie energii całkowitej E i potencjału chemicznego μ w funkcji temperatury, otrzymane dla dwóch rozmiarów sieci $N_s = 8$ i $N_s = 10$. Równanie stanu dla temperatur $T > 0.14 \varepsilon_F$ jest bardzo dobrze odtwarzane przez zależność temperaturową energii nieoddziałującego gazu Fermiego o tej samej gęstości, przesuniętą o stałą wartość $\xi_s = 0.52 E_{fg}$, gdzie $E_{fg} = \frac{3}{5} N \varepsilon_F$ jest energią nieoddziałującego gazu Fermiego dla $T = 0$. Poniżej temperatury $T < 0.14 \varepsilon_F$ obserwujemy odstępstwo równania stanu od zależności temperaturowej (przesuniętej) energii dla nieoddziałującego gazu Fermiego. Odstępstwo to uważamy za sygnaturę wystąpienia przejścia fazowego. Warto również zauważyć, że dla temperatur $T \lesssim 0.10 \varepsilon_F$ potencjał chemiczny można uważać za stały. Otrzymane wyniki dla równania stanu i potencjału chemicznego wykazują duże podobieństwo do wyników otrzymanych dla granicy unitarnej, patrz rysunek 1.3.

W celu otrzymania energii stanu podstawowego wykonaliśmy ekstrapolację danych do temperatury zera bezwzględnego. W wyniku otrzymaliśmy, że energia stanu podstawowego dla rozrzedzonej materii neutronowej o gęstości $p_F \simeq 0.45 \text{ fm}^{-1}$ przyjmuje wartość $E/E_{fg} = 0.46(2)$ ($E/N = 1.22(5) \text{ MeV}$). Odpowiadający jej potencjał chemiczny przyjmuje wartość $\mu = 0.41 \varepsilon_F$ (1.8 MeV). Jak należało się spodziewać, otrzymana przez nas energia stanu podstawowego jest niższa od wyników otrzymanych przez innych autorów wykorzystujących techniki Monte Carlo, patrz rysunki 1.9 oraz 4.14. Wynika to z faktu, że nasze podejście daje w pełni nieperturbacyjny i nieograniczony żadnymi więzami wynik, w przeciwieństwie do istniejących obliczeń Monte Carlo, które w istocie dają wariacyjne oszacowanie (górne ograniczenie) energii stanu podstawowego. Zaskakujące jest natomiast, że otrzymane oszacowanie energii stanu podstawowego jest o około 20% – 40% niższe niż wyniki innych obliczeń Monte Carlo dla tej samej gęstości, co należy uznać za dużą rozbieżność.

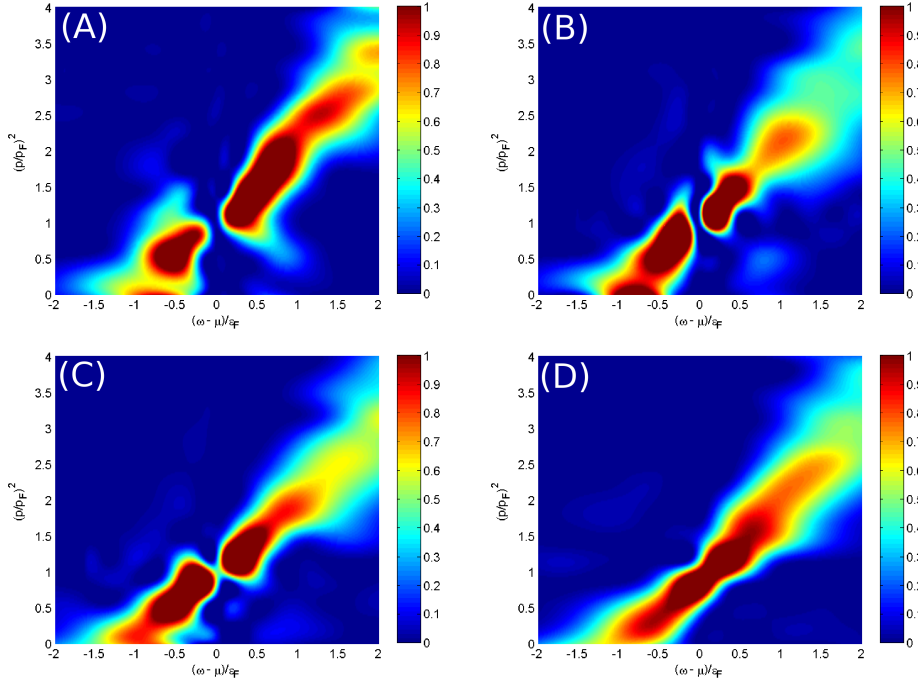
W celu wyznaczenia temperatury krytycznej przejścia fazowego pomiędzy stanem normalnym a nadciekłym wykorzystaliśmy metodę opartą na teorii skalowania dla układów skończonych, patrz podrozdział 3.6. W tym celu za pomocą metody Monte Carlo wyznaczyliśmy współczynnik kondensacji α dla trzech różnych wielkości sieci, wzór (3.184). Otrzymane wyniki przedstawia rysunek 4.15. Wyniki dla sieci $N_s = 6$ znacząco odstają od wyników otrzymanych dla większych sieci $N_s = 8, 10$. Wynika to z faktu, że dla sieci $N_s = 6$ bok pudła L jest niewystarczający aby poprawnie oszacować wartość graniczną $\lim_{r \rightarrow \infty} h(r)$. Uniemożliwia nam to wykorzystanie w pełni procedury wyznaczania temperatury krytycznej T_c za pomocą równań (3.191) i (3.192), gdyż to wymaga poprawnego określenia α dla co najmniej trzech



Rysunek 4.15: Współczynnik kondensacji α dla trzech różnych wielkości sieci w funkcji temperatury. Wyniki dla sieci $N_s = 6$ znacząco odstają od wyników otrzymanych dla większych sieci $N_s = 8, 10$. Wynika to z faktu, że dla sieci $N_s = 6$ bok pudła L jest niewystarczający aby poprawnie oszacować wartość graniczną $\lim_{r \rightarrow \infty} h(r) = \alpha$. Wewnętrzny wykres przedstawia przeskalowany współczynnik kondensacji otrzymany dla sieci $N_s = 8$ i $N_s = 10$. Współrzędne punktu przecięcia określają temperaturę krytyczną, $T_c \approx 0.09 \varepsilon_F$.

różnych rozmiarów sieci (obliczenia dla sieci $N_s > 10$ są w praktyce niemożliwe do wykonania, ze względu na bardzo długie czasy obliczeń). Z tego powodu aby określić temperaturę krytyczną wykorzystaliśmy tylko dane dla sieci $N_s = 8$ i $N_s = 10$, tzn. za dobre oszacowanie temperatury krytycznej T_c przyjęliśmy współrzędne punktu przecięcia przeskalowanego współczynnika kondensacji $L^{1+\eta}\alpha$, patrz rysunek 4.15 oraz dyskusja w podrozdziale 3.6.2. Opierając się na naszych doświadczeniach uważamy, że wykorzystane rozmiary sieci są wystarczająco duże aby na ich podstawie określić temperaturę krytyczną z niepewnością względną mniejszą niż 20% (zastosowanie dokładnie takiej samej procedury do danych otrzymanych dla zimnych gazów atomowych prowadzi do określenia T_c z błędem względnym mniejszym niż 10%). W wyniku zastosowania opisaną powyżej procedurę dla rozrzedzonej materii neutronowej o gęstości $p_F \approx 0.45 \text{ fm}^{-1}$, otrzymaliśmy temperaturę krytyczną $T_c \approx 0.09 \varepsilon_F$. Należy zauważyć, że podobnie jak miało to miejsce dla rozrzedzonych gazów atomowych, jest to temperatura istotnie niższa niż temperatura dla której obserwujemy odstępstwo równania stanu od zależności temperaturowej energii dla nieoddziałującego gazu Fermiego, $T_c < T_0 \approx 0.14 \varepsilon_F$.

W celu zbadania ewolucji szczeliny energetycznej w funkcji temperatury, wyznaczono

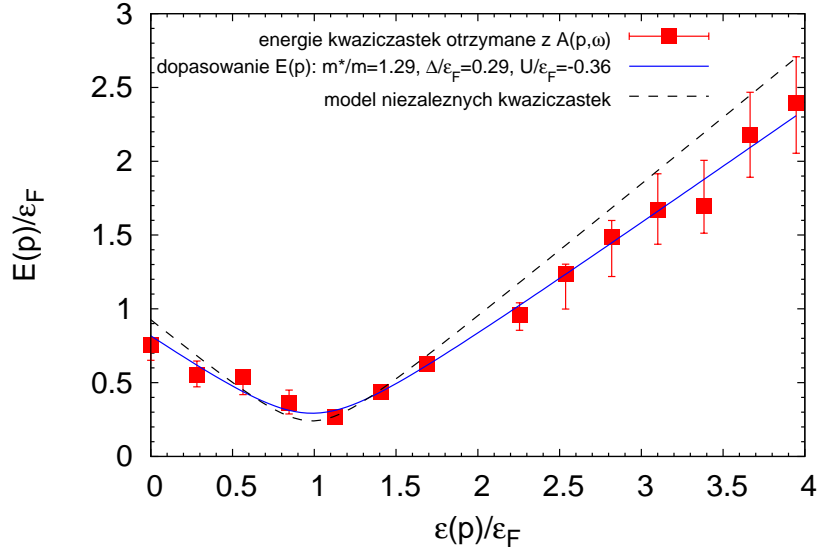


Rysunek 4.16: Funkcja spektralna dla rozrzedzonej materii neutronowej o gęstości $p_F \approx 0.45 \text{ fm}^{-1}$, A) $T \approx 0.06 \varepsilon_F < T_c$, B) $T \approx 0.08 \varepsilon_F \approx T_c$, C) $T \approx 0.10 \varepsilon_F \approx T_c$, D) $T \approx 0.12 \varepsilon_F > T_c$. Widoczne jest istnienie szczeliny energetycznej aż do temperatury krytycznej $T_c \approx 0.09 \varepsilon_F$.

funkcję spektralną $A(\mathbf{p}, \omega)$, w taki sam sposób jak dla przypadku reżimu unitarnego. Wyniki obliczeń dla czterech wybranych temperatur przedstawia rysunek 4.16. Otrzymane wyniki wskazują, że szczelina energetyczna istnieje co najmniej do temperatury $T^* \approx 0.10 \varepsilon_F \approx T_c$. Powyżej temperatury $T^* \approx 0.10 \varepsilon_F$ rozmiar szczeliny energetycznej spada poniżej możliwości rozdzielczej zastosowanych metod, która w tym przypadku została oszacowana na $\Delta_{\min} \approx 0.2 \varepsilon_F$. Z tego powodu, podobnie jak dla przypadku zimnych gazów atomowych, nie jest możliwe dokładne zlokalizowanie temperatury znikania przerwy energetycznej.

Na podstawie otrzymanych funkcji spektralnych, wyznaczono spektrum wzbudzeń kwazicząstek $E(\mathbf{p})$, poprzez zlokalizowanie maksimum $A(\mathbf{p}, \omega)$ dla ustalonego \mathbf{p} . Dla wszystkich rozważanych temperatur otrzymane w ten sposób spektrum wzbudzeń kwazicząstek można opisać za pomocą relacji typu BCS danej równaniem (4.15), dopasowując ją ze względu na parametry m^* , U i Δ .

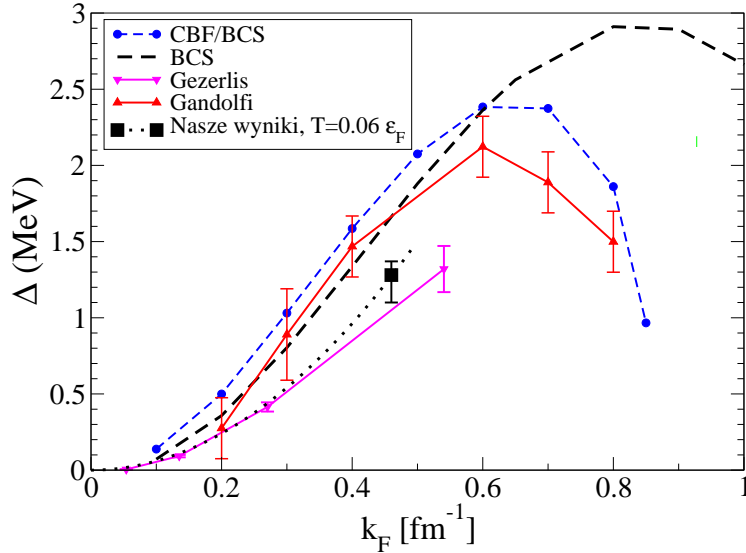
Rysunek 4.17 przedstawia otrzymane widmo wzbudzeń kwazicząstek dla najniższej rozważanej temperatury $T \approx 0.06 \varepsilon_F$. Energie wzbudzeń otrzymane dla tej temperatury będziemy



Rysunek 4.17: Energie wzbudzeń kwazicząstek $E(\mathbf{p})$ otrzymane na podstawie funkcji spektralnej $A(\mathbf{p}, \omega)$, dla najniższej osiągalnej przez nas temperatury $T = 0.06 \varepsilon_F$, dla rozrzedzonej materii neutronowej o gęstości $p_F \approx 0.45 \text{ fm}^{-1}$ (czerwone kwadraty). ε_F jest energią Fermiego, $\varepsilon(\mathbf{p}) = \frac{p^2}{2m} - \mu$. Linia ciągła (niebieska) przedstawia wynik dopasowania relacji dyspersyjnej typu BCS, danej równaniem (4.15), ze względu na parametry m^* , U , Δ . Relacja typu BCS jest w stanie poprawnie odtworzyć spektrum kwazicząstek dla każdej rozważanej przez nas temperatury. Linia przerywana przedstawia energie wzbudzeń kwazicząstek otrzymane przy założeniu, że układ składa się z niezależnych kwazicząstek.

traktowali jako dobre przybliżenie energii wzbudzeń kwazicząstek dla temperatury zera bezwzględnego. Dopasowanie relacji typu BCS daje wartości parametrów: $m^*/m = 1.29^{+0.22}_{-0.15}$, $U/\varepsilon_F = -0.36(12)$ i $\Delta/\varepsilon_F = 0.29^{+0.02}_{-0.04}$. Zaskakującym wynikiem jest duża wartość masy efektywnej, która jest istotnie większa od masy „gołej” cząstki, chociaż mamy do czynienia z układem silnie rozrzedzonym. Drugim ważnym spostrzeżeniem jest, że stosunek $\Delta/T_c \approx 3.2$ daje wartość około dwukrotnie większą niż wynika to z teorii BCS, gdzie $\Delta_0^{(BCS)}/T_c \approx 1.76$. Fizycznie oznacza to, że podobnie jak dla gazu atomów w reżimie unitarnym, pojawiający się stan nadciekły nie może być poprawnie opisany w ramach standardowej teorii BCS.

Na rysunku 4.18 przedstawiono porównanie wartości szczeliny energetycznej dla temperatury zera bezwzględnego otrzymane przez innych autorów z naszym wynikiem. Dla przejrzystości rysunku pozostawiono jedynie wyniki otrzymane za pomocą metody Monte Carlo oraz teorii BCS. Otrzymany wynik bardzo dobrze zgadza się z wynikami otrzymanymi przez A. Gezerlisa i J. Carlsona [46], którzy również wykorzystali efektywne oddziaływanie opisa-

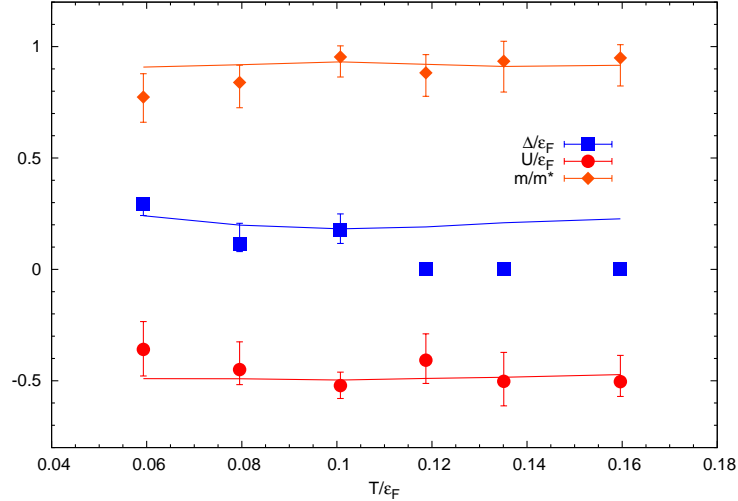


Rysunek 4.18: Szczelina energetyczna dla temperatury zera bezwzględnej w funkcji gęstości. Porównanie wyników otrzymanych metodami Monte Carlo. Wyniki pochodzą z prac: Gezerlis [46], Gandolfi [80]. Dla porównania dodane również zostały wyniki teorii BCS oraz CFB/BCS [107] (baza funkcji skorelowanych, rozszerzenie teorii BCS). Linia kropkowana przedstawia równanie $\Delta(k_F) = 0.29 k_F^2/2m$.

ne za pomocą dwóch parametrów, tj. a i r_{eff} . Obliczenia uwzględniające wpływ pozostałych kanałów jak i sił trójciałowych (S. Gandolfi *et al.*, [80]) prowadzą do większej wartości szczeliny energetycznej, niż wartość wyznaczona przez nas. Należy jednak zauważyć, że w obu przypadkach obliczenia były obciążone fermionowym problemem znaku. Z tego powodu nie jest możliwe jednoznaczne rozstrzygnięcie przyczyny obserwowanych rozbieżności.

Podobnie jak dla reżimu unitarnego, wyznaczyliśmy energie wzbudzeń kwazicząstek zakładając, że układ można opisać jako układ niezależnych kwazicząstek, patrz równania (4.16) i (4.17). Otrzymany w ten sposób wynik odtwarza dobrze energie $E(\mathbf{p})$ dla pędów znajdujących się blisko powierzchni Fermiego, patrz linia przerywana na rysunku 4.17. Obserwowana rozbieżność dla pędów znajdujących się daleko od powierzchni Fermiego wynika z mniejszej wartości masy efektywnej jakie generuje to podejście, $m^*/m = 1.1$. Wartości pozostałych dwóch parametrów, tj. szczelina energetyczna Δ i potencjał jednocząstkowy U nie zmieniają się istotnie.

Rysunek 4.19 przedstawia ewolucję parametrów spektrum jednocząstkowego w funkcji temperatury. Dla porównania za pomocą linii przedstawiono ewolucję parametrów jednocząstkowych otrzymanych przy założeniu, że układ można opisać jako układ niezależnych kwazi-



Rysunek 4.19: Ewolucja parametrów spektrum jednocząstkowego: m^* (romby), U (koła), Δ (kwadraty) w funkcji temperatury dla rozrzedzonej materii neutronowej o gęstości $p_F \approx 0.45 \text{ fm}^{-1}$. Widoczne jest istnienie szczeliny energetycznej dla temperatur $T \lesssim T_c$. Linie ciągłe przedstawiają kolejno od góry: masę efektywną, szczelinę energetyczną i potencjał jednocząstkowy, wyznaczone przy założeniu, że układ można opisać za pomocą modelu nieoddziałujących kwazicząstek. Model taki poprawnie odtwarza parametry spektrum jednocząstkowego dla temperatur $T \lesssim T_c$.

cząstek. Model ten dobrze odtwarza ewolucję średniego potencjału jednocząstkowego U jak i masy efektywnej m^* dla całego zbadanego obszaru temperatur (jedynie dla najniższej temperatury, $T \approx 0.06 \varepsilon_F$, masa efektywna nie jest odtwarzana w ramach oszacowanej niepewności). Podobnie jak miało to miejsce dla gazu atomów znajdujących się w granicy unitarnej (patrz rysunek 4.7), ewolucja szczeliny energetycznej jest dobrze odtwarzana jedynie dla temperatur $T \lesssim T_c$.

Porównanie naszych wyników z wynikami otrzymanymi dla przypadku zimnych gazów atomowych ($r_{\text{eff}} \rightarrow 0$) dostarcza informacji o wpływie niezerowej wartości zasięgu efektywnego na końcowy rezultat. Na podstawie danych zawartych w publikacji [39] wnioskujemy, że efekty związane z uwzględnieniem zasięgu efektywnego nie wpływają istotnie na wartość energii stanu podstawowego (dla $r_{\text{eff}} \rightarrow 0$: $E^{(0)}/E_{\text{fg}} \approx 0.45$). Znaczącemu zmniejszeniu ulegają natomiast wartości szczeliny energetycznej i temperatury krytycznej przejścia fazowego (dla $r_{\text{eff}} \rightarrow 0$: $\Delta^{(0)}/\varepsilon_F \approx 0.41$ i $T_c^{(0)}/\varepsilon_F \approx 0.13$). Jednakże, stosunek $\Delta^{(0)}/T_c^{(0)} \approx 3.2$ pozostaje niezmienny gdy zwiększamy wartość zasięgu efektywnego, do wartości odpowiadającej oddziaływaniu neutron-neutron. Należy również zauważyć, że w obu przypadkach obserwu-

jemy istnienie drugiej charakterystycznej temperatury $T_0 > T_c$, poniżej której obserwuje się odstępstwo od (przesuniętego) równania stanu doskonałego gazu Fermiego.

Największy wpływ zasięg efektywny ma na wartość masy efektywnej. Dla oddziaływania kontaktowego otrzymujemy masę efektywną równą masie „gołej” cząstki (dla $r_{\text{eff}} \rightarrow 0$: $m^*/m \approx 1.0$), podczas gdy dla $p_F r_{\text{eff}} \approx 1.26$ wartość masy efektywnej wzrasta o 30% (dla rozrzedzonej materii neutronowej o gęstości $p_F \approx 0.45 \text{ fm}^{-1}$: $m^*/m \approx 1.3$). Podobny efekt, tj.: wzrost masy efektywnej dla rozrzedzonej materii neutronowej do wartości znacznie większej od masy „gołej” cząstki, został ostatnio również otrzymany w ramach efektywnej teorii pola [65].

Podsumowując, z wyjątkiem zmian ilościowych otrzymane wyniki nie wykazują jakościowych zmian w porównaniu z przypadkiem oddziaływania o zerowym zasięgu efektywnym. Na tej podstawie wyciągamy wniosek, że fizyka opisująca rozrzedzoną materię neutronową jest taka sama jak w przypadku zimnych gazów atomowych [212]. W szczególności spodziewamy się istnienia fazy „pseudoszczeliny”, podobnie jak ma to miejsce dla reżimu unitarnego. Z tego powodu badania nad zimnymi gazami atomowymi mogą nam dostarczyć wielu wartościowych informacji o fizyce materii neutronowej w niskich gęstościach.

Podsumowanie

W rozprawie przedstawiono wyniki dokładnych obliczeń, które wykonaliśmy dla gazu zimnych atomów znajdujących się w reżimie unitarnym oraz dla rozrzedzonej materii neutronowej. W celu wykonania dokładnych obliczeń, które pozbawione są niekontrolowanych przybliżeń, wykorzystaliśmy metodę kwantowego Monte Carlo, zdefiniowaną dla temperatur skończonych.

W przypadku obliczeń dla zimnych gazów atomowych, rozprawa ta stanowi kontynuację badań, które zostały wykonane przez autorów: A. Bulgac, J. Drut i P. Magierski [39]. Z tego powodu badania skupiły się jedynie na zbadaniu, dotychczas nieznanych, właściwości charakteryzujących stan nadciekły, który pojawia się w niskich temperaturach. W tym celu opracowano metodologię wyznaczania funkcji spektralnej poprzez wykonanie przedłużenia analitycznego temperaturowej funkcji Greena z osi czasów urojonych do osi czasów rzeczywistych. Ponieważ jest to problem numerycznie źle uwarunkowany, wymagane było wykorzystanie specjalnie zaprojektowanych do tego celu metod matematycznych: metody SVD oraz metody maksymalnej entropii. W wyniku licznie przeprowadzonych testów numerycznych, z użyciem autorskiego oprogramowania, zidentyfikowano możliwości rekonstrukcyjne wymienionych podejść, które okazały się być wystarczające aby wyznaczyć z powodzeniem funkcję spektralną dla zimnych gazów atomowych w reżimie unitarnym.

Do najważniejszych wyników jakie otrzymaliśmy dla gazu zimnych atomów w reżimie unitarnym zaliczamy:

1. Odkrycie istnienia tzw. fazy „pseudoszczeliny”, w której układ nie jest w stanie nadciekłym, pomimo że nadal istnieją w nim pary Coopera (niezerowa wartość szczeliny energetycznej).
2. Wyznaczenie ewolucji szczeliny energetycznej w funkcji temperatury.
3. Wyznaczenie w funkcji temperatury ewolucji pozostałych parametrów charakteryzujących widmo wzbudzeń kwazicząstek, takich jak masa efektywna m^* , średni potencjał

jednocząstkowy U , dla stałych sprężenia $1/p_{Fa} \leq 0$.

4. Zidentyfikowanie, że dla temperatur poniżej temperatury krytycznej przejścia fazowego T_c , otrzymane parametry spektrum kwazicząstkowego (m^* , U , Δ) można poprawnie odtworzyć zakładając, że układ można opisać jako układ niezależnych kwazicząstek.

Otrzymane wyniki oczekują na weryfikację eksperymentalną, która powinna stać się możliwa w najbliższych latach z uwagi na ogromny postęp jaki cały czas dokonuje się w dziedzinie pułapkowania i chłodzenia rozrzedzonych gazów atomowych.

Bez wątplenia, odkrycie istnienia fazy „pseudoszczeliny” dla gazu zimnych atomów będącego w reżimie unitarnym, należy uznać za najważniejszy wynik tej rozprawy. Łącząc rezultat ten z wynikami otrzymanymi we wcześniejszych pracach (zobacz np. [34]) wnioskujemy, że gaz zimnych atomów nie jest nadprzewodnikiem typu BCS lecz należy go uznać za nowy rodzaj nadprzewodnika o właściwościach bardzo podobnych do nadprzewodników wysokotemperaturowych.

Dużym wyzwaniem było uogólnienie wykorzystanej metody na przypadek oddziaływania ze skończonym zasięgiem efektywnym, w taki sposób aby uniknąć wprowadzenia do problemu niekontrolowanego błędu. Cel ten został osiągnięty, wykorzystując szczególny przypadek rozszerzonego modelu Hubbarda dla którego skonstruowano dyskretną transformację Hubbarda-Stratonovicha, niezmienniczą ze względu na odwrócenie w czasie. Ta szczególna cecha zaproponowanej transformacji pozwoliła na uniknięcie fermionowego problemu znaku, który jak wiadomo dotyczy większości układów fermionowych. W konsekwencji możliwe było wykonanie dokładnych obliczeń, wolnych od niekontrolowanych błędów. Zgodnie z wiedzą autora, nigdy wcześniej nie wykonano takich obliczeń dla oddziaływania przyciągającego ze skończonym zasięgiem efektywnym.

Aby opracowane uogólnienie metody Monte Carlo można było zastosować do rozrzedzonej materii neutronowej, wymagane było poprawne ustalenie stałych sprężenia oddziaływania w taki sposób aby poprawnie odtwarzać niskoenergetyczne przesunięcia fazowe δ_l . W tym celu opracowano autorską metodę wyznaczania stałych sprężenia oddziaływania, które w sposób poprawny odtwarzają wartości długości rozpraszania i zasięgu efektywnego w sytuacji, gdy problem zdefiniowany jest na sieci.

Do najważniejszych wyników jakie otrzymaliśmy dla rozrzedzonej materii neutronowej o gęstości 0.003 fm^{-3} zaliczamy:

1. Wyznaczenie zależności energii całkowitej oraz potencjału chemicznego w funkcji temperatury.
2. Wyznaczenie temperatury krytycznej przejścia fazowego pomiędzy stanem normalnym a nadciekłym.
3. Wyznaczenie ewolucji w funkcji temperatury parametrów charakteryzujących widmo wzbudzeń kwazicząstek, tj. masy efektywnej m^* , średniego potencjału jednocząstkowego U i szczeliny energetycznej Δ .

Chociaż nie udało się w sposób jednoznaczny potwierdzić istnienia fazy „pseudoszczeliny” dla tego układu (z powodu niewystarczającej zdolności rekonstrukcyjnej metod SVD i maksymalnej entropii), to otrzymane wyniki wskazują, że układ ten również nie jest nadprzewodnikiem typu BCS. Świadczy o tym otrzymana przez nas duża wartość stosunku $\Delta/T_c \approx 3.2$, która jest około dwukrotnie większa niż wynika to z teorii BCS. Drugim argumentem potwierdzającym słuszność tej hipotezy jest brak jakościowych różnic w wynikach, w porównaniu z wynikami otrzymanymi dla reżimu unitarnego, gdzie jednoznacznie stwierdzono istnienie fazy „pseudoszczeliny”. Wynik ten należy uznać za ważny z uwagi na powszechnie panujący pogląd wśród fizyków jądrowych, że stan nadciekły/nadprzewodzący w układach jądrowych o małych gęstościach można opisać w ramach teorii BCS. Brak jakościowych różnic pomiędzy gazem zimnych atomów a rozrzedzoną materią neutronową jest również rezultatem szczególnie interesującym, gdyż oznacza on, że badania nad zimnymi gazami atomowymi mogą nam dostarczyć wielu wartościowych informacji o fizyce materii neutronowej w niskich gęstościach.

Stabilizacja algorytmu w niskich temperaturach

Obliczenia Monte Carlo wymagają wyznaczenia elementów macierzowych operatora $\mathcal{U}(\{\sigma\})$. Macierz \mathcal{U} powstaje jako wynik mnożenia dużej ilości macierzy, patrz wzór (3.20):

$$\mathcal{U}(\{\sigma\}) = \prod_{k=1}^{N_\tau} \mathcal{W}(\sigma_k) = \mathcal{W}_{N_\tau} \mathcal{W}_{N_\tau-1} \dots \mathcal{W}_2 \mathcal{W}_1. \quad (19)$$

Wiadome jest, że mnożenie dużej ilości macierzy staje się numerycznie niestabilne, jeśli elementy macierzowe wyniku mnożenia są liczbami zmieniającymi się w dużym zakresie. W przypadku metody Monte Carlo zakres obejmowany przez wartości własne macierzy \mathcal{U} rozbiega się eksponencjalnie wraz z obniżaniem temperatury, tzn.: $u_h/u_l \sim e^\beta$, gdzie u_h i u_l są odpowiednio największą i najmniejszą wartością własną. W celu uniknięcia niestabilności mnożenia, w przypadku obliczeń dla niskich temperatur, wykorzystuje się procedurę stabilizacyjną opartą na rozkładzie singularnym macierzy (SVD) [39, 151].

W celu wykorzystania metody stabilizacyjnej SVD zdefiniujmy ciąg macierzy:

$$\mathcal{U}_1 = \mathcal{W}_1, \quad (20)$$

$$\mathcal{U}_2 = \mathcal{W}_2 \mathcal{W}_1 = \mathcal{W}_2 \mathcal{U}_1, \quad (21)$$

...

$$\mathcal{U}_{N_\tau} = \mathcal{W}_{N_\tau} \mathcal{W}_{N_\tau-1} \dots \mathcal{W}_1 = \mathcal{W}_{N_\tau} \mathcal{U}_{N_\tau-1}. \quad (22)$$

Rozkład SVD dowolnej macierzy \mathcal{U}_n prowadzi do odseparowania różnych występujących „skal” liczbowych, co możemy symbolicznie zapisać jako:

$$\mathcal{U}_n = S_n D_n V_n = \begin{pmatrix} x & x & x \\ x & x & x \\ x & x & x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X & & \\ & x & \\ & & x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x & x & x \\ x & x & x \\ x & x & x \end{pmatrix}, \quad (23)$$

gdzie D_n jest macierzą diagonalną z dodatnimi wartościami należącymi do różnych skal, co zostało symbolicznie pokazane za pomocą (X, x, x) . Macierze S_n i V_n są macierzami unitarnymi, gdzie wszystkie elementy macierzowe należą do tej samej skali. Idea podejścia polega na zauważeniu, że mnożenie macierzy D_n z prawej strony nie powoduje „mieszania” skal:

$$\mathcal{U}_n = (S_n D_n) V_n = \begin{pmatrix} X & x & x \\ X & x & x \\ X & x & x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x & x & x \\ x & x & x \\ x & x & x \end{pmatrix}. \quad (24)$$

Wykorzystując tą właściwość, procedurę mnożenia wykonujemy w następujący sposób:

$$\mathcal{U}_1 = \mathcal{W}_1 = S_1 D_1 V_1, \quad (25)$$

$$\mathcal{U}_2 = \mathcal{W}_2 \mathcal{U}_1 = (\mathcal{W}_2 S_1 D_1) V_1 = S_2 D_2 V_2 V_1, \quad (26)$$

gdzie w drugim równaniu wykonano mnożenie elementów znajdujących się w nawiasie i następnie dla wyniku mnożenia ponownie dokonano rozkładu SVD w celu odseparowania skal. Postępując podobnie dla kolejnych macierzy \mathcal{U}_n otrzymujemy ostatecznie:

$$\mathcal{U}(\{\sigma\}) = \mathcal{U}_{N_\tau} = S_{N_\tau} D_{N_\tau} V_{N_\tau} V_{N_\tau-1} \dots V_1 = S_{N_\tau} D_{N_\tau} \tilde{V}_{N_\tau}. \quad (27)$$

W ostatnim kroku wykonano mnożenie macierzy $\tilde{V}_{N_\tau} = V_{N_\tau} V_{N_\tau-1} \dots V_1$. Mnożenie to jest numerycznie stabilne, gdyż wszystkie macierze V_n zawierają elementy macierzowe należące do tej samej skali. Zauważmy, że ostatni wzór przedstawia rozkład SVD macierzy $\mathcal{U}(\{\sigma\})$, gdyż iloczyn macierzy unitarnych jest macierzą unitarną.

Otrzymany rozkład SVD macierzy $\mathcal{U}(\{\sigma\})$ można wykorzystać w celu obliczenia wyznacznika:

$$\begin{aligned} \det[1 + \mathcal{U}(\{\sigma\})] &= \det[1 + S_{N_\tau} D_{N_\tau} \tilde{V}_{N_\tau}] \\ &= \det[S_{N_\tau} (S_{N_\tau}^\dagger \tilde{V}_{N_\tau}^\dagger + D_{N_\tau}) \tilde{V}_{N_\tau}] \\ &= \det[S_{N_\tau} (S' D' V') \tilde{V}_{N_\tau}] \\ &= \det[S_{N_\tau} S'] \det[D'] \det[V' \tilde{V}_{N_\tau}]. \end{aligned} \quad (28)$$

Wyznacznik macierzy unitarnych $S_{N_\tau} S'$ i $V' \tilde{V}_{N_\tau}$ jest co do modułu równy 1, tzn.:

$$|\det[S_{N_\tau} S'] \det[V' \tilde{V}_{N_\tau}]| = 1. \quad (29)$$

Może on zostać pominięty z uwagi na brak problemu znaku dla prezentowanych przypadków.

Zatem ostatecznie, obliczenie wyznacznika sprowadza się do iloczynów elementów diagonalnych macierzy D' :

$$\det[1 + \mathcal{U}(\{\sigma\})] = \prod_i D'_{ii}. \quad (30)$$

W podobny sposób można wyznaczyć macierz gęstości, która pojawia się we wzorach na wartość oczekiwaną operatora jedno i dwuciałowego:

$$\frac{\mathcal{U}(\{\sigma\})}{1 + \mathcal{U}(\{\sigma\})} = 1 - \frac{1}{1 + \mathcal{U}(\{\sigma\})} = 1 - \tilde{V}_{N_\tau}^\dagger V'^\dagger D'^{-1} S'^\dagger S_{N_\tau}^\dagger. \quad (31)$$

Macierz D'^{-1} można łatwo wyznaczyć z uwagi na fakt, że D' jest macierzą diagonalną.

Wykonywanie dużej liczby rozkładów SVD wprowadza znaczący koszt numeryczny do obliczeń. Aby zmniejszyć ten koszt, rozkład SVD wykonuje się co pewną liczbę mnożeń macierzy \mathcal{W}_n , tzn. definiuje się ciąg:

$$\mathcal{U}_1 = \mathcal{W}_t \dots \mathcal{W}_1, \quad (32)$$

$$\mathcal{U}_2 = (\mathcal{W}_{2t} \dots \mathcal{W}_{t+1}) \mathcal{U}_1, \quad (33)$$

...

$$\mathcal{U}(\{\sigma\}) = \mathcal{U}_{N_\tau/t} = (\mathcal{W}_{N_\tau} \dots \mathcal{W}_{N_\tau-t+1}) \mathcal{U}_{N_\tau/t-1}. \quad (34)$$

Dalsza procedura jest taka sama jak opisana powyżej. W wyniku przeprowadzonych testów otrzymaliśmy, że w praktycznych obliczeniach, w celu zapewnienia stabilności algorytmu, wystarczające jest wykonanie 8 rozkładów SVD dla najniższych temperatur.

Bibliografia

- [1] Bogner S.K., Furnstahl R.J., Perry R.J., Schwenk A., *Are low-energy nuclear observables sensitive to high-energy phase shifts?*, Phys. Lett. **B 649**, 488 (2007)
- [2] Bethe H.A., *Theory of the Effective Range in Nuclear Scattering*, Phys. Rev. **76**, 38 (1949)
- [3] Stoks V.G.J., Klomp R.A.M., Rentmeester M.C.M., de Swart J.J., *Partial-wave analysis of all nucleon-nucleon scattering data below 350 MeV*, Phys. Rev. **C 48**, 792 (1993)
- [4] Entem D.R., Machleidt R., *Accurate nucleon-nucleon potential based upon chiral perturbation theory*, Phys. Lett. **B 524**, 93 (2002)
- [5] Coraggio L., Covello A., Gargano A., Itaco N., Kuo T.T.S., Machleidt R., *Nuclear structure calculations and modern nucleon-nucleon potentials*, Phys. Rev. **C 71**, 014307 (2005)
- [6] Machleidt R., *The theory of nuclear forces: Is the never-ending story coming to an end?*, Nucl. Phys. **A 790**, 17 (2007)
- [7] Schiff L.I., *Mechanika kwantowa*, PWN, Warszawa 1977
- [8] Pethick C.J., Smith H., *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*, Cambridge, University Press 2002
- [9] Anderson M.H., Ensher J.R., Matthews M.R., Wieman C.E., Cornell E.A., *Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor*, Science **269**, 198 (1995)
- [10] Bradley C.C., Sackett C.A., Tollett J.J., Hulet R.G., *Evidence of Bose-Einstein Condensation in an Atomic Gas with Attractive Interactions*, Phys. Rev. Lett. **75**, 1687 (1995)

- [11] Davis K.B., Mewes M.-O., Andrews M.R., van Druten N.J., Durfee D.S., Kurn D.M., Ketterle W., *Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms*, Phys. Rev. Lett. **75**, 3969 (1995)
- [12] De Marco B., Jin D.S., *Onset of Fermi Degeneracy in a Trapped Atomic Gas*, Science **285**, 1703 (1999)
- [13] Truscott A.G., Strecker K.E., McAlexander W.I., Partridge G.B., Hulet R.G., *Observation of Fermi Pressure in a Gas of Trapped Atoms*, Science **291**, 2570 (2001)
- [14] Schreck F., Khaykovich L., Corwin K.L., Ferrari G., Bourdel T., Cubizolles J., Salomon C., *Quasipure Bose-Einstein Condensate Immersed in a Fermi Sea*, Phys. Rev. Lett. **87**, 080403 (2001)
- [15] Regal C.A., Ticknor C., Bohn J.L., Jin D.S., *Creation of ultracold molecules from a Fermi gas of atoms*, Nature **424**, 47 (2003)
- [16] Bourdel T., Cubizolles J., Khaykovich L., Magalhães K.M.F., Kokkelmans S.J.J.M.F., Shlyapnikov G.V., Salomon C., *Measurement of the Interaction Energy near a Feshbach Resonance in a ^6Li Fermi Gas*, Phys. Rev. Lett. **91**, 020402 (2003)
- [17] O'Hara K.M., Hemmer S.L., Gehm M.E., Granade S.R., Thomas J.E., *Observation of a Strongly-Interacting Degenerate Fermi Gas of Atoms*, Science **298**, 2179 (2002)
- [18] Jochim S., Bartenstein M., Altmeyer A., Hendl G., Riedl S., Chin C., Denschlag J.H., Grimm R., *Bose-Einstein Condensation of Molecules*, Science **302**, 2101 (2003)
- [19] Zwierlein M.W., Stan C.A., Schunck C.H., Raupach S.M.F., Gupta S., Hadzibabic Z., Ketterle W., *Observation of Bose-Einstein Condensation of Molecules*, Phys. Rev. Lett. **91**, 250401 (2003)
- [20] Partridge G.B., Strecker K.E., Kamar R.I., Jack M.W., Hulet R.G., *Molecular Probe of Pairing in the BEC-BCS Crossover*, Phys. Rev. Lett. **95**, 020404 (2005)
- [21] Loftus T., Regal C.A., Ticknor C., Bohn J.L., Jin D.S., *Resonant Control of Elastic Collisions in an Optically Trapped Fermi Gas of Atoms*, Phys. Rev. Lett. **88**, 173201 (2002)

- [22] Bloch I., Dalibard J., Zwerger W., *Many-Body Physics with Ultracold Gases*, Rev. Mod. Phys. **80**, 885 (2008)
- [23] Giorgini S., Pitaevskii L.P., Stringari S., *Theory of ultracold atomic Fermi gases*, Rev. Mod. Phys. **80**, 1215 (2008)
- [24] Bardeen J., Cooper L.N., Schrieffer J.R., *Theory of Superconductivity*, Phys. Rev. **108**, 1175 (1957)
- [25] Petrov D.S., Salomon C., Shlyapnikov G.V., *Scattering properties of weakly bound dimers of fermionic atoms*, Phys. Rev. A **71**, 012708 (2005)
- [26] Brodsky I.V., Kagan M.Y., *Exact diagrammatic approach for dimer-dimer scattering and bound states of three and four resonantly interacting particles*, Phys. Rev. A **73**, 032724 (2006)
- [27] Dalfovo F., Giorgini S., Pitaevskii L.P., Stringari S., *Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases*, Rev. Mod. Phys. **71**, 463 (1999)
- [28] Chen Q., Stajic J., Tan S., Levin K., *BCS-BEC crossover: From high temperature superconductors to ultracold superfluids*, Physics Reports **412**, 1 (2005)
- [29] Fetter A.L., Walecka J.D., *Kwantowa teoria układów wielu cząstek*, PWN, Warszawa 1988
- [30] Carlson J., Chang S.-Y., Pandharipande V.R., Schmidt K.E., *Superfluid Fermi Gases with Large Scattering Length*, Phys. Rev. Lett. **91**, 050401 (2003)
- [31] Chang S.-Y., Pandharipande V.R., Carlson J., Schmidt K.E., *Quantum Monte Carlo studies of superfluid Fermi gases*, Phys. Rev. A **70**, 043602 (2004)
- [32] Astrakharchik G.E., Boronat J., Casulleras J., Giorgini S., *Equation of State of a Fermi Gas in the BEC-BCS Crossover: A Quantum Monte Carlo Study*, Phys. Rev. Lett. **93**, 200404 (2004)
- [33] G.E. Astrakharchik, J. Boronat, J. Casulleras, and S. Giorgini, *Momentum Distribution and Condensate Fraction of a Fermion Gas in the BCS-BEC Crossover*, Phys. Rev. Lett. **95**, 230405 (2005)

- [34] Bulgac A., Drut J.E., Magierski P., *Spin 1/2 Fermions in the Unitary Regime: A Superfluid of a New Type*, Phys. Rev. Lett. **96**, 090404 (2006)
- [35] Burovski E., Prokof'ev N., Svistunov B., Troyer M., *Critical Temperature and Thermodynamics of Attractive Fermions at Unitarity*, Phys. Rev. Lett. **96**, 160402 (2006)
- [36] Burovski E., Prokof'ev N., Svistunov B., Troyer M., *The Fermi-Hubbard model at unitarity*, New J. Phys. **8**, 153 (2006)
- [37] Lee D., Schafer T., *Cold dilute neutron matter on the lattice. I. Lattice virial coefficients and large scattering lengths*, Phys. Rev. C **73**, 015201 (2006)
- [38] Lee D., Schafer T., *Cold dilute neutron matter on the lattice. II. Results in the unitary limit*, Phys. Rev. C **73**, 015202 (2006)
- [39] Bulgac A., Drut J.E., Magierski P., *Quantum Monte Carlo simulations of the BCS-BEC crossover at finite temperature*, Phys. Rev. A **78**, 023625 (2008)
- [40] Heiselberg H., Pethick C.J., Smith H., Viverit L., *Influence of Induced Interactions on the Superfluid Transition in Dilute Fermi Gases*, Phys. Rev. Lett. **85**, 2418 (2000)
- [41] Pilati S., Giorgini S., Prokof'ev N., *Critical Temperature of Interacting Bose Gases in Two and Three Dimensions*, Phys. Rev. Lett. **100**, 140405 (2008)
- [42] Burovski E., Kozik E., Prokof'ev N., Svistunov B., Troyer M., *Critical Temperature Curve in BEC-BCS Crossover*, Phys. Rev. Lett. **101**, 090402 (2008)
- [43] Carlson J., Reddy S., *Superfluid Pairing Gap in Strong Coupling*, Phys. Rev. Lett. **100**, 150403 (2008)
- [44] Schirotzek A., Shin Y.-il, Schunck Ch.H, Ketterle W., *Determination of the Superfluid Gap in Atomic Fermi Gases by Quasiparticle Spectroscopy*, Phys. Rev. Lett. **101**, 140403 (2008)
- [45] Carlson J., Reddy S., *Asymmetric Two-Component Fermion Systems in Strong Coupling*, Phys. Rev. Lett. **95**, 060401 (2005)
- [46] Gezerlis A., Carlson J., *Strongly paired fermions: Cold atoms and neutron matter*, Phys. Rev. C **77**, 032801(R) (2008)

- [47] Feshbach H., *Unified Theory of Nuclear Reactions*, Ann. Phys. **5**, 357 (1958)
- [48] Stoof H.T.C., Koelman J.M.V.A, Verhaar B.J., *Spin-exchange and dipole relaxation rates in atomic hydrogen: Rigorous and simplified calculations*, Phys. Rev. **B 38**, 4688 (1988)
- [49] Moerdijk A.J., Verhaar B.J., Axelsson A., *Resonances in ultracold collisions of ${}^6\text{Li}$, ${}^7\text{Li}$, and ${}^{23}\text{Na}$* , Phys. Rev. **A 51**, 4852 (1995)
- [50] Tiesinga E., Verhaar B.J., Stoof H.T.C., *Threshold and resonance phenomena in ultracold ground-state collisions*, Phys. Rev. **A 47**, 4114 (1993)
- [51] Ho T., *Universal Thermodynamics of Degenerate Quantum Gases in the Unitarity Limit*, Phys. Rev. Lett. **92**, 090402 (2004)
- [52] Hu H., Drummond P.D., Liu X.-J., *Universal thermodynamics of strongly interacting Fermi gases*, Nature Physics **3**, 469 (2007)
- [53] Bartenstein M., Altmeyer A., Riedl S., Jochim S., Geursen R., Chin C., Hecker Denschlag J., Grimm R., *Exploring the BEC-BCS Crossover with an Ultracold Gas of ${}^6\text{Li}$ Atoms*, arXiv:cond-mat/0412712v1
- [54] Kinast J., Turlapov A., Thomas J.E., Chen Q., Stajic J., Levin K., *Heat Capacity of a Strongly Interacting Fermi Gas*, Science **307**, 1296 (2005)
- [55] Partridge G.B., Li W., Kamar R.I., Liao Y., Hulet R.G., *Pairing and Phase Separation in a Polarized Fermi Gas*, Science **311**, 503 (2006)
- [56] Tarruell L., Teichmann M., McKeever J., Bourdel T., Cubizolles J., Khaykovich L., Zhang J., Navon N., Chevy F., Salomon C., *Expansion of an ultra-cold lithium gas in the BEC-BCS crossover*, arXiv:cond-mat/0701181v1
- [57] Stewart J.T., Gaebler J.P., Regal C.A., Jin D.S., *Potential Energy of a ${}^{40}\text{K}$ Fermi Gas in the BCS-BEC Crossover*, Phys. Rev. Lett. **97**, 220406 (2006)
- [58] Thomas J.E., Kinast J., Turlapov A., *Virial Theorem and Universality in a Unitary Fermi Gas*, Phys. Rev. Lett. **95**, 120402 (2005)

- [59] Lattimer J.M., Prakash M., *Neutron Star Structure and the Equation of State*, *Astrophys. J.* **550**, 426 (2001)
- [60] Heiselberg H., Pandharipande V., *Recent progress in neutron star theory*, *Ann. Rev. Nucl. Part. Sci.* **50**, 481 (2000)
- [61] Yakovlev D.G., Pethick C.J., *Neutron Star Cooling*, *Ann. Rev. Astron. Astrophys.* **42**, 169 (2004)
- [62] Bender M., Heenen P.-H., Reinhard P.-G., *Self-consistent mean-field models for nuclear structure*, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 121 (2003)
- [63] Baldo M., Maieron C., *Neutron matter at low density and the unitary limit*, *Phys. Rev. C* **77**, 015801 (2008)
- [64] Gezerlis A., Carlson J., *Low-density neutron matter*, arXiv:0911.3907v1
- [65] Hebeler K., Schwenk A., *Chiral three-nucleon forces and neutron matter*, arXiv:0911.0483v1
- [66] Schwenk A., Pethick C.J., *Resonant Fermi Gases with a Large Effective Range*, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 160401 (2005)
- [67] Kohler H.S., *Spin 1/2 Fermions in the Unitary Limit.II*, arXiv:0801.1123v2
- [68] Ceperley D., Chester G.V., Kalos M.H., *Exact calculations of the ground state of model neutron matter*, *Phys. Rev. D* **13**, 3208 (1976)
- [69] Ceperley D., Chester G.V., Kalos M.H., *Monte Carlo simulation of a many-fermion study*, *Phys. Rev. B* **16**, 3081 (1977)
- [70] Friedman B., Pandharipande V.R., *Hot and cold, nuclear and neutron matter*, *Nucl. Phys. A* **361**, 502 (1981)
- [71] Akmal A., Pandharipande V.R., Ravenhall D.G., *Equation of state of nucleon matter and neutron star structure*, *Phys. Rev. C* **58**, 1804 (1998)
- [72] Fantoni S., Sarsa A., Schmidt K.E., *Spin Susceptibility of Neutron Matter at Zero Temperature*, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 181101 (2001)

- [73] Morales J., Pandharipande V.R., Ravenhall D.G., *Improved variational calculations of nucleon matter*, Phys. Rev. C **66**, 054308 (2002)
- [74] Brualla L., Fantoni S., Sarsa A., Schmidt K.E., Vitiello S.A., *Spin-orbit induced back-flow in neutron matter with auxiliary field diffusion Monte Carlo method*, Phys. Rev. C **67**, 065806 (2003)
- [75] Sarsa A., Fantoni S., Schmidt K.E., *Neutron matter at zero temperature with an auxiliary field diffusion Monte Carlo method*, Phys. Rev. C **68**, 024308 (2003)
- [76] Carlson J., Morales J., Pandharipande V.R., Ravenhall D.G., *Quantum Monte Carlo calculations of neutron matter*, Phys. Rev. C **68**, 025802 (2003)
- [77] Chang S.-Y., Morales J., Pandharipande V.R., Ravenhall D.G., Carlson J., Pieper S.C., Wiringa R.B., Schmidt K.E., *Neutron matter: a superfluid gas*, Nucl. Phys. A **746**, 215 (2004)
- [78] Fabrocini A., Fantoni S., Illarionov A.Y., Schmidt K.E., *1S_0 Superfluid Phase Transition in Neutron Matter with Realistic Nuclear Potentials and Modern Many-Body Theories*, Phys. Rev. Lett. **95**, 192501 (2004)
- [79] Gandolfi S., *The Auxiliary Field Diffusion Monte Carlo Method for Nuclear Physics and Nuclear Astrophysics*, Rozprawa doktorska, Uniwersytet Trento, Włochy, 2007, arXiv:0712.1364v1
- [80] Gandolfi S., Illarionov A.Y., Fantoni S., Pederiva F., Schmidt K.E., *Equation of State of Superfluid Neutron Matter and the Calculation of the 1S_0 Pairing Gap*, Phys. Rev. Lett. **101**, 132501 (2008)
- [81] Epelbaum E., Krebs H., Lee D., Meißner U.-G., *Ground state energy of dilute neutron matter at next-to-leading order in lattice chiral effective field theory*, Eur. Phys. J. A **40**, 199 (2009)
- [82] Gandolfi S., Illarionov A.Y., Schmidt K.E., Pederiva F., Fantoni S., *Quantum Monte Carlo calculation of the equation of state of neutron matter*, Phys. Rev. C **79**, 054005 (2009)

- [83] Gandolfi S., Illarionov A.Y., Pederiva F., Schmidt K.E., Fantoni S., *Equation of state of low-density neutron matter, and the 1S_0 pairing gap*, Phys. Rev. C **80**, 045802 (2009)
- [84] Abe T., Seki R., Kocharian A.N., *Mean field calculation of thermal properties of simple nucleon matter on a lattice*, Phys. Rev. C **70**, 014315 (2004)
- [85] Tolos L., Friman B., Schwenk A., *Neutron matter at finite temperature*, Nucl. Phys. A **806**, 105 (2008)
- [86] Friman B., Hebeler K., Schwenk A., Tolos L., *Neutron matter from low-momentum interactions*, Prog. Theor. Phys. Suppl. **168**, 639 (2007)
- [87] Köhler H.S., *Low density Neutron Matter at Finite and Zero Temperatures*, arXiv:0803.3048v1
- [88] Müller H.-M., Koonin S.E., Seki R., Kolck U., *Nuclear matter on a lattice*, Phys. Rev. C **61**, 044320 (2000)
- [89] Lee D., Borasoy B., Schaefer T., *Nuclear lattice simulations with chiral effective field theory*, Phys. Rev. C **70**, 014007 (2004)
- [90] Lee D., Schäfer T., *Neutron matter on the lattice with pionless effective field theory*, Phys. Rev. C **72**, 024006 (2005)
- [91] Abe T., Seki R., *Lattice Calculation of Thermal Properties of Low-Density Neutron Matter with Pionless NN Effective Field Theory*, Phys. Rev. C **79**, 054002 (2009)
- [92] Yakovlev D.G., Kaminker A.D., Gnedin O.Y., Haensel P., *Neutrino Emission from Neutron Stars*, Physics Reports **354**, 1 (2001)
- [93] Kaminker A.D., Haensel P., Yakovlev D.G., *Nucleon Superfluidity vs Observations of Cooling Neutron Stars*, Astron. Astrophys. **373**, L17 (2001)
- [94] Yakovlev D.G., Kaminker A.D., Gnedin O.Y., *1S_0 Neutron Pairing vs Observations of Cooling Neutron Stars*, Astron. Astrophys. **379**, L5 (2001)
- [95] Lombardo U., Schulze H.-J., *Superfluidity in Neutron Star Matter*, Lect. Notes Phys. **578**, 30 (2001)

- [96] Dean D.J., Hjorth-Jensen M., *Pairing in nuclear systems: from neutron stars to finite nuclei*, Rev. Mod. Phys. **75**, 607 (2003)
- [97] Matsuo M., Mizuyama K., Serizawa Y, *Di-neutron correlation and soft dipole excitation in medium mass neutron-rich nuclei near drip line*, Phys. Rev. C **71**, 064326 (2005)
- [98] Hagino K., Sagawa H., *Pairing correlations in nuclei on the neutron-drip line*, Phys. Rev. C **72**, 044321 (2005)
- [99] Matsuo M., *Spatial structure of neutron Cooper pair in low density uniform matter*, Phys. Rev. C **73**, 044309 (2006)
- [100] Elgarøy Ø., Hjorth-Jensen M., *Nucleon-nucleon phase shifts and pairing in neutron matter and nuclear matter*, Phys. Rev. C **57**, 1174 (1998)
- [101] Hebeler K., Schwenk A., Friman B., *Dependence of the BCS 1S_0 superfluid pairing gap on nuclear interactions*, Phys. Lett. **B 648**, 176 (2007)
- [102] Wambach J., Ainsworth T.L., Pines D., *Quasiparticle interactions in neutron matter for applications in neutron stars*, Nucl. Phys. **A 555**, 128 (1993)
- [103] Chen J.M.C, Clark J.W, Davé R.D, Khodel V.V., *Pairing gaps in nucleonic superfluids*, Nucl. Phys. **A 555**, 59 (1993)
- [104] Schulze H.-J., Cugnon J., Lejeune A., Baldo M., Lombardo U., *Medium polarization effects on neutron matter superfluidity*, Phys. Lett. **B 375**, 1 (1996)
- [105] Schwenk A., Friman B., Brown G.E., *Renormalization group approach to neutron matter: quasiparticle interactions, superfluid gaps and the equation of state*, Nucl. Phys. **A 713**, 191 (2003)
- [106] Cao L.G., Lombardo U., Schuck P., *Screening effects in superfluid nuclear and neutron matter within Brueckner theory*, Phys. Rev. C **74**, 064301 (2006)
- [107] Fabrocini A., Fantoni S., Illarionov A.Y., Schmidt K.E., *S-pairing in neutron matter: I. Correlated basis function theory*, Nucl. Phys. **A 803**, 137 (2008)
- [108] Margueron J., Sagawa H., Hagino K., *Effective pairing interactions with isospin density dependence*, Phys. Rev. C **77**, 054309 (2008)

- [109] Pieper S.C., Pandharipande V R., Wiringa R.B., Carlson J., *Realistic models of pion-exchange three-nucleon interactions*, Phys. Rev. C **64**, 014001 (2001)
- [110] Pieper S.C., *Quantum Monte Carlo Calculations of Light Nuclei*, Nucl. Phys. A **751**, 516 (2005)
- [111] Gandolfi S., Pederiva F., Fantoni S., Schmidt K.E., *Auxiliary Field Diffusion Monte Carlo Calculation of Nuclei with $A \leq 40$ with Tensor Interactions*, Phys. Rev. Lett. **99**, 022507 (2007)
- [112] Kent R.P.C., *Techniques and Applications of Quantum Monte Carlo*, Rozprawa doktorska, Uniwersytet Cambridge, Wielka Brytania, 1999, Dostępny w Internecie [dostęp: 07-01-2010]: <http://www.physics.uc.edu/~pkent/thesis/>
- [113] Ceperley D.M., Alder B.J., *Quantum Monte Carlo for molecules: Green's function and nodal release*, J. Chem. Phys. **81**, 5830 (1984)
- [114] Carlson J., Gubernatis J.E., Ortiz G., Zhang S., *Issues and observations on applications of the constrained-path Monte Carlo method to many-fermion systems*, Phys. Rev. B **59**, 12788 (1999)
- [115] Eagles D.M., *Possible Pairing without Superconductivity at Low Carrier Concentrations in Bulk and Thin-Film Superconducting Semiconductors*, Phys. Rev. **186**, 456 (1969)
- [116] Legget A.J., w *Modern Trends in the Theory of Condensed Matter*, pod redakcją Pekalski. A i Przystawa R, Springer-Verlag, Berlin 1980
- [117] Sá de Melo C.A.R., Randeria M., Engelbrecht J.R., *Crossover from BCS to Bose superconductivity: Transition temperature and time-dependent Ginzburg-Landau theory*, Phys. Rev. Lett. **71**, 3202 (1993)
- [118] Haussmann R., *Properties of a Fermi liquid at the superfluid transition in the crossover region between BCS superconductivity and Bose-Einstein condensation*, Phys. Rev. B **49**, 12975 (1994)
- [119] Engelbrecht J.R., Randeria M., Sá de Melo C.A.R., *BCS to Bose crossover: Broken-symmetry state*, Phys. Rev. B **55**, 15153 (1997)

- [120] Bruun G., Castin Y., Dum R., Burnett K., *BCS theory for trapped ultracold fermions*, Eur. Phys. J. **D 7**, 433 (1999)
- [121] Holland M., Kokkelmans S.J.J.M.F., Chiofalo M.L., Walser R., *Resonance Superfluidity in a Quantum Degenerate Fermi Gas*, Phys. Rev. Lett. **87**, 120406 (2001)
- [122] Ohashi Y., Griffin A., *BCS-BEC Crossover in a Gas of Fermi Atoms with a Feshbach Resonance*, Phys. Rev. Lett. **89**, 130402 (2002)
- [123] Milstein J.N., Kokkelmans S.J.J.M.F., Holland M.J., *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)
- [124] Ohashi Y., Griffin A., *Superfluid transition temperature in a trapped gas of Fermi atoms with a Feshbach resonance*, Phys. Rev. **A 67**, 033603 (2003)
- [125] Liu X.-J., Hui H., *Self-consistent theory of atomic Fermi gases with a Feshbach resonance at the superfluid transition*, Phys. Rev. **A 72**, 063613 (2005)
- [126] Hohenberg P., Kohn W., *Inhomogeneous Electron Gas*, Phys. Rev. **136**, B864 (1964)
- [127] Bulgac A., *Local density approximation for systems with pairing correlations*, Phys. Rev. **C 65**, 051305 (2002)
- [128] Bulgac A., Yu Y., *Renormalization of the Hartree-Fock-Bogoliubov Equations in the Case of a Zero Range Pairing Interaction*, Phys. Rev. Lett. **88**, 042504 (2002)
- [129] Yu Y., Bulgac A., *Energy Density Functional Approach to Superfluid Nuclei*, Phys. Rev. Lett. **90**, 222501 (2003)
- [130] Bulgac A., Yu Y., *Vortex State in a Strongly Coupled Dilute Atomic Fermionic Superfluid*, Phys. Rev. Lett. **91**, 190404 (2003)
- [131] Bulgac A., Yu Y., *Superfluid LDA (SLDA): Local Density Approximation for Systems with Superfluid Correlations*, Int. J. Mod. Phys. **E 13**, 147 (2004)
- [132] Bulgac A., *Local-density-functional theory for superfluid fermionic systems: The unitary gas*, Phys. Rev. **A 76**, 040502 (2007)

- [133] Georges A., Kotliar G., *Hubbard model in infinite dimensions*, Phys. Rev. **B 45**, 6479 (1992)
- [134] Georges A., Kotliar G., Krauth W., Rozenberg M.J., *Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions*, Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996)
- [135] Keller M., Metzner W., Schollwöck U., *Dynamical Mean-Field Theory for Pairing and Spin Gap in the Attractive Hubbard Model*, Phys. Rev. Lett. **86**, 4612 (2001)
- [136] Capone M., Castellani C., Grilli M., *First-Order Pairing Transition and Single-Particle Spectral Function in the Attractive Hubbard Model*, Phys. Rev. Lett. **88**, 126403 (2002)
- [137] Toschi A., Capone M., Castellani C., *Energetic balance of the superconducting transition across the BCS-Bose Einstein crossover in the attractive Hubbard model*, Phys. Rev. **B 72**, 235118 (2005)
- [138] Garg A., Krishnamurthy H.R., Randeria M., *BCS-BEC crossover at $T=0$: A dynamical mean-field theory approach*, Phys. Rev. **B 72**, 024517 (2005)
- [139] Barnea N., *Dynamical mean-field approximation for a two-component Fermi gas*, Phys. Rev. **B 77**, 020501 (2008)
- [140] Barnea N., *Superfluid-to-insulator phase transition in a unitary Fermi gas*, Phys. Rev. **A 78**, 053629 (2008)
- [141] Nishida Y., *Unitary Fermi gas in the ϵ expansion*, Rozprawa doktorska, Uniwersytet Tokijski, Japonia, 2006, arXiv:cond-mat/0703465v2
- [142] Nishida Y., Son D.T., *ϵ Expansion for a Fermi Gas at Infinite Scattering Length*, Phys. Rev. Lett. **97**, 050403 (2006)
- [143] Arnold P., Drut J.E., Son D.T., *Next-to-next-to-leading-order ϵ expansion for a Fermi gas at infinite scattering length*, Phys. Rev. **A 75**, 043605 (2007)
- [144] Nishida Y., Son D.T., *Fermi gas near unitarity around four and two spatial dimensions*, Phys. Rev. **A 75**, 063617 (2007)

- [145] Nishida Y., *Unitary Fermi gas at finite temperature in the ϵ expansion*, Phys. Rev. A **75**, 063618 (2007)
- [146] Nishida Y., *Ground-state energy of the unitary Fermi gas from the ϵ expansion*, Phys. Rev. A **79**, 013627 (2009)
- [147] Nussinov Z., Nussinov S., *Triviality of the BCS-BEC crossover in extended dimensions: Implications for the ground state energy*, Phys. Rev. A **74**, 053622 (2006)
- [148] Creutz M., Gocksch A., *Higher-order hybrid Monte Carlo algorithms*, Phys. Rev. Lett. **63**, 9 (1989)
- [149] Forbert H.A., Chin S.A., *A Fourth Order Diffusion Monte Carlo Algorithm for Solving Quantum Many-Body Problems*, Int. J. Mod. Phys. B **15**, 1752 (2001)
- [150] Chin S.A., Janecek S., Krotscheck E., *Any order imaginary time propagation method for solving the Schrödinger equation*, Chem. Phys. Lett. **470**, 342 (2009)
- [151] Koonin S.E., Dean D.J., Langanke K., *Shell Model Monte Carlo Methods*, Physics Reports **278**, 1 (1997)
- [152] Alhassid Y., *Quantum Monte Carlo Methods for Nuclei at Finite Temperature*, Int. J. Mod. Phys. B **15**, 1447 (2001)
- [153] Negele J.W., Orland H., *Quantum many-particle systems*, Addison-Wesley, Redwood City 1988
- [154] Feynman R.P., Hibbs A.R., *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill, Inc. 1965
- [155] Morningstar C., *The Monte Carlo method in quantum field theory*, arXiv:hep-lat/0702020v1
- [156] Katzgraber H.G., *Introduction to Monte Carlo Methods*, arXiv:0905.1629v1
- [157] Metropolis N., Rosenbluth A.W., Rosenbluth M.N., Teller A.H., Teller E., *Equation of State Calculations by Fast Computing Machines*, J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953)
- [158] Troyer M., Wiese U.-J., *Computational Complexity and Fundamental Limitations to Fermionic Quantum Monte Carlo Simulations*, Phys. Rev. Lett. **94**, 170201 (2005)

- [159] Kadanoff L.P., Baym G., *Quantum Statistical Mechanics*, W.A. Benjamin, Inc., New York 1962
- [160] Littlejohn R.G., Cargo M., *Multidimensional discrete variable representation bases: Sinc functions and group theory*, J. Chem. Phys. **116**, 7350 (2002)
- [161] Littlejohn R.G., Cargo M., Carrington T., Mitchell K.A., Poirier B., *A general framework for discrete variable representation basis sets*, J. Chem. Phys. **116**, 8691 (2002)
- [162] Lüscher M., *Two-particle states on a torus and their relation to the scattering matrix*, Nucl. Phys. **B 354**, 531 (1991)
- [163] Seki R., Kolck U., *Effective field theory of nucleon-nucleon scattering on large discrete lattices*, Phys. Rev. **C 73**, 044006 (2006)
- [164] Wlazłowski G., Magierski P., *Effective range expansion for the interaction defined on the lattice*, Int. J. Mod. Phys. **E 19**, (w druku), arXiv:0911.1457
- [165] Taylor J.R., *Scattering Theory: The Quantum Theory of Nonrelativistic Collisions*, John Wiley & Sons, Inc. 1972
- [166] Hubbard J., *Calculation of Partition Functions*, Phys. Rev. Lett. **3**, 77 (1959)
- [167] Hirsch J.E., *Discrete Hubbard-Stratonovich transformation for fermion lattice models*, Phys. Rev. **B 28**, 4059 (1983)
- [168] Lee D., *Ground state energy at unitarity*, Phys. Rev. **C 78**, 024001 (2008)
- [169] Wlazłowski G., Magierski P., *Quantum Monte Carlo method applied to strongly correlated dilute fermi gases with finite effective range*, Int. J. Mod. Phys. **E 18**, 919 (2009)
- [170] Schüttler H.-B., Scalapino D.J., *Monte Carlo studies of the dynamical response of quantum many-body systems*, Phys. Rev. **B 34**, 4744 (1986)
- [171] Jarrell M., Gubernatis J.E., *Bayesian inference and the analytic continuation of imaginary-time quantum Monte Carlo data*, Physics Reports **269**, 133 (1996)
- [172] Bertero M., Mol C., Pike E.R., *Linear inverse problems with discrete data. I. General formulation and singular system analysis*, Inverse Problems **1**, 301 (1985)

- [173] Bertero M., Mol C., Pike E.R., *Linear inverse problems with discrete data: II. Stability and regularisation*, Inverse Problems **4**, 573 (1988)
- [174] Creffield C.E., Klepfish E.G., Pike E.R., Sarkar S., *Spectral Weight Function for the Half-Filled Hubbard Model: A Singular Value Decomposition Approach*, Phys. Rev. Lett. **75**, 517 (1995)
- [175] Villiers G.D., McNally B., Pike E.R., *Positive solutions to linear inverse problems*, Inverse Problems **15**, 615 (1999)
- [176] Jaynes E.T, *The Maximum Entropy Formalism*, edited by R.D. Levine and M. Tribus, MIT Press, Cambridge 1978, s. 15-118
- [177] Silver R.N., Sivia D.S., Gubernatis J.E., *Maximum-entropy method for analytic continuation of quantum Monte Carlo data*, Phys. Rev. **B 41**, 2380 (1990)
- [178] Silver R.N., Gubernatis J.E., Sivia D.S., *Spectral densities of the symmetric Anderson model*, Phys. Rev. Lett. **65**, 496 (1990)
- [179] White S.R., *Spectral weight function for the two-dimensional Hubbard model*, Phys. Rev. **B 44**, 4670 (1991)
- [180] Yang C.N., *Concept of Off-Diagonal Long-Range Order and the Quantum Phases of Liquid He and of Superconductors*, Rev. Mod. Phys. **34**, 694 (1962)
- [181] Huang K., *Podstawy fizyki statystycznej*, PWN, Warszawa 2006
- [182] Domb C., Lebowitz J.L., *Phase Transitions and Critical Phenomena, Volume 8*, Academic Press Inc., London 1983
- [183] Binder K., *Application of the Monte Carlo Method in Statistical Physics*, Springer-Verlag, Berlin 1984
- [184] Binder K., Heermann D.W., *Monte Carlo Simulations in Statistical Physics. An Introduction.*, Springer-Verlag, Berlin 2002
- [185] Lee D., Thomson R., *Temperature-dependent errors in nuclear lattice simulations*, Phys. Rev. **C 75**, 064003 (2007)
- [186] The FFT library, [dostęp: 23-11-2009]. Dostępny w Internecie: <http://www.fftw.org>

- [187] Luo L., Clancy B., Joseph J., Kinast J., Thomas J.E., *Measurement of the Entropy and Critical Temperature of a Strongly Interacting Fermi Gas*, Phys. Rev. Lett. **98**, 080402 (2007)
- [188] Bulgac A., Drut J.E., Magierski P., *Thermodynamics of a Trapped Unitary Fermi Gas*, Phys. Rev. Lett. **99**, 120401 (2007)
- [189] Magierski P., Wlazłowski G., Bulgac A., Drut J.E., *Finite-Temperature Pairing Gap of a Unitary Fermi Gas by Quantum Monte Carlo Calculations*, Phys. Rev. Lett. **103**, 210403 (2009)
- [190] Hübner S., Hossain M.A., Damascelli A., Sawatzky G.A., *Two gaps make a high-temperature superconductor?*, Rep. Prog. Phys. **71**, 062501 (2008)
- [191] Lee P.A., *From high temperature superconductivity to quantum spin liquid: progress in strong correlation physics*, Rep. Prog. Phys. **71**, 012501 (2008)
- [192] Buchanan M., *Mind the pseudogap*, Nature **409**, 8 (2001)
- [193] Lee W.S., Vishik I.M., Tanaka K., Lu D.H., Sasagawa T., Nagaosa N., Devereaux T.P., Hussain Z., Shen Z.-X., *Abrupt onset of a second energy gap at the superconducting transition of underdoped Bi2212*, Nature **450**, 81 (2007)
- [194] Kondo T., Khasanov R., Takeuchi T., Schmalian J., Kaminski A., *Competition between the pseudogap and superconductivity in the high- T_c copper oxides*, Nature **457**, 296 (2009)
- [195] Stajic J., Milstein J.N., Chen Q., Chiofalo M.L., Holland M.J., Levin K., *Nature of superfluidity in ultracold Fermi gases near Feshbach resonances*, Phys. Rev. A **69**, 063610 (2004)
- [196] Perali A., Pieri P., Pisani L., Strinati G.C., *BCS-BEC Crossover at Finite Temperature for Superfluid Trapped Fermi Atoms*, Phys. Rev. Lett. **92**, 220404 (2004)
- [197] He Y., Chien Ch.-Ch., Chen Q., Levin K., *Thermodynamics and superfluid density in BCS-BEC crossover with and without population imbalance*, Phys. Rev. **B 76**, 224516 (2007)

- [198] Chien Ch.-Ch., Guo H., He Y., Levin K., *Comparative Study of BCS-BEC Crossover Theories above T_c : the Nature of the Pseudogap in Ultra-Cold Atomic Fermi Gases*, arXiv:0910.3699v1
- [199] Chin C., Bartenstein M., Altmeyer A., Riedl S., Jochim S., Hecker Denschlag J., Grimm R., *Observation of the Pairing Gap in a Strongly Interacting Fermi Gas*, *Science* **305**, 1128 (2004)
- [200] Greiner M., Regal C.A., Jin D.S., *Probing the Excitation Spectrum of a Fermi Gas in the BCS-BEC Crossover Regime*, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 070403 (2005)
- [201] Schunck C.H., Shin Y., Schirotzek A., Zwierlein M.W., Ketterle W., *Pairing without Superfluidity: The Ground State of an Imbalanced Fermi Mixture*, *Science* **316**, 867 (2007)
- [202] Stewart J.T., Gaebler J.P., Jin D.S., *Using photoemission spectroscopy to probe a strongly interacting Fermi gas*, *Nature* **454**, 744 (2008)
- [203] Kinnunen J., Rodríguez M., Törmä P., *Pairing Gap and In-Gap Excitations in Trapped Fermionic Superfluids*, *Science* **305**, 1131 (2004)
- [204] He Y., Chen Q., Levin K., *Radio-frequency spectroscopy and the pairing gap in trapped Fermi gases*, *Phys. Rev. A* **72**, 011602 (2005)
- [205] Yu Z., Baym G., *Spin-correlation functions in ultracold paired atomic-fermion systems: Sum rules, self-consistent approximations, and mean fields*, *Phys. Rev. A* **73**, 063601 (2006)
- [206] Baym G., Pethick C.J., Yu Z., Zwierlein M.W., *Coherence and Clock Shifts in Ultracold Fermi Gases with Resonant Interactions*, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 190407 (2007)
- [207] Punk M., Zwerger W., *Theory of rf-Spectroscopy of Strongly Interacting Fermions*, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 170404 (2007)
- [208] Perali A., Pieri P., Strinati G.C., *Competition between Final-State and Pairing-Gap Effects in the Radio-Frequency Spectra of Ultracold Fermi Atoms*, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 010402 (2008)

- [209] Massignan P., Bruun G.M., Stoof H.T.C., *Twin peaks in rf spectra of Fermi gases at unitarity*, Phys. Rev. A **77**, 031601 (2008)
- [210] Hausmann R., Punk M., Zwirger W., *Spectral functions and rf response of ultracold fermionic atoms*, Phys. Rev. A **80**, 063612 (2009)
- [211] Bruun G.M., Baym G., *Bragg spectroscopy of cold atomic Fermi gases*, Phys. Rev. A **74**, 033623 (2006)
- [212] Wlazłowski G., Magierski P., *Quantum Monte Carlo study of dilute neutron matter at finite temperatures*, arXiv:0912.0373v1