

Effektive Wechselwirkungen für Quantenflüssigkeiten und Quantengase

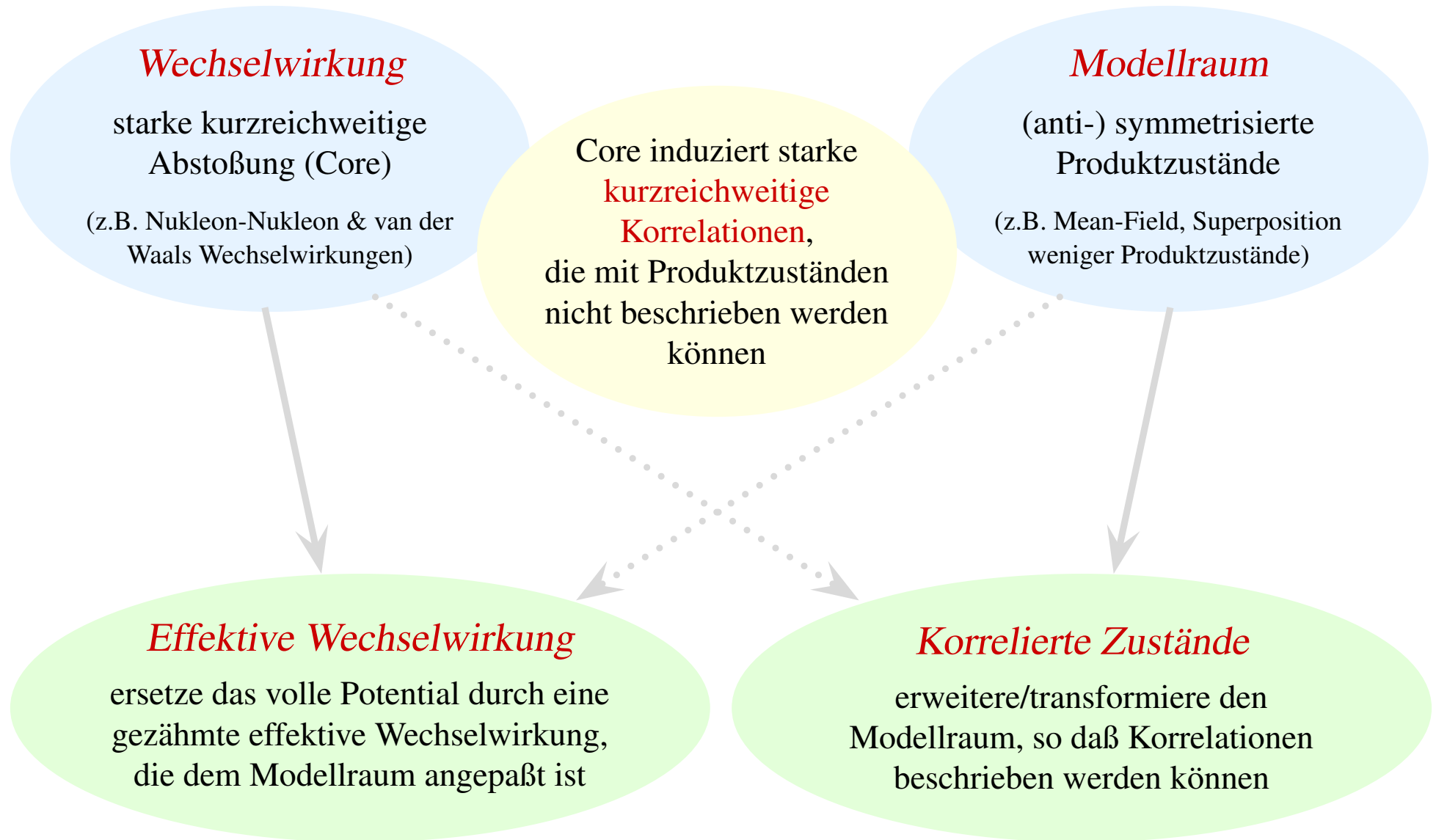
*Kernmaterie, flüssiges Helium und
ultrakalte atomare Gase*

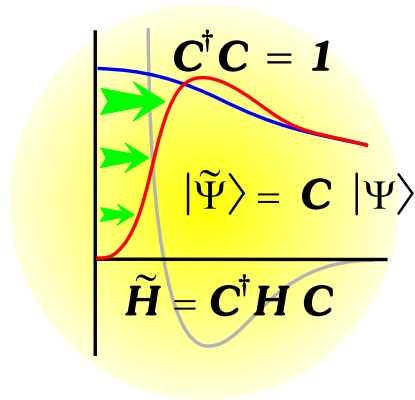
Robert Roth

Technische Universität Darmstadt

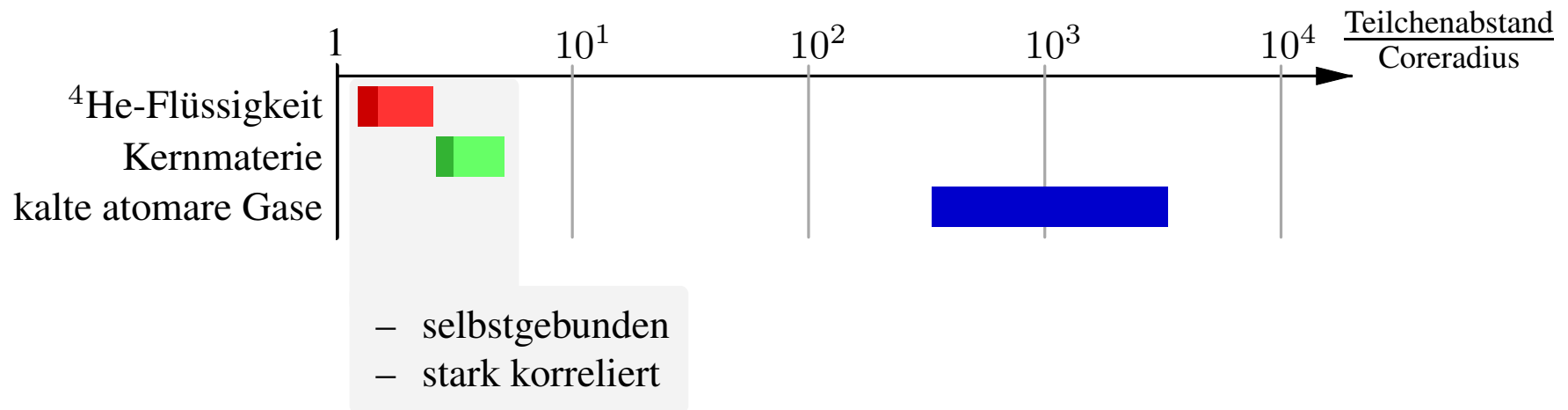
25. Oktober 2000

Das Problem der kurzreichweitigen Korrelationen





*Die Methode der
 unitären Korrelatoren
 in Anwendung auf
 dichte Quantenflüssigkeiten*



Konzept der Methode der unitären Korrelatoren

Unitärer Korrelationsoperator

beschreibt kurzreichweitige Korrelationen durch eine radiale abstandsabhängige Verschiebung in der Relativkoordinate \vec{r} des Zweiteilchensystems

$$\mathbf{C} = \exp \left[-i \sum_{i < j} \mathbf{g}_{ij} \right] \quad \mathbf{g} = \frac{1}{2} \left[s(\mathbf{r}) \frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{\mathbf{q}} + \text{h.c.} \right]$$

korrelierte Zustände

$$|\tilde{\psi}\rangle = \mathbf{C} |\psi\rangle$$

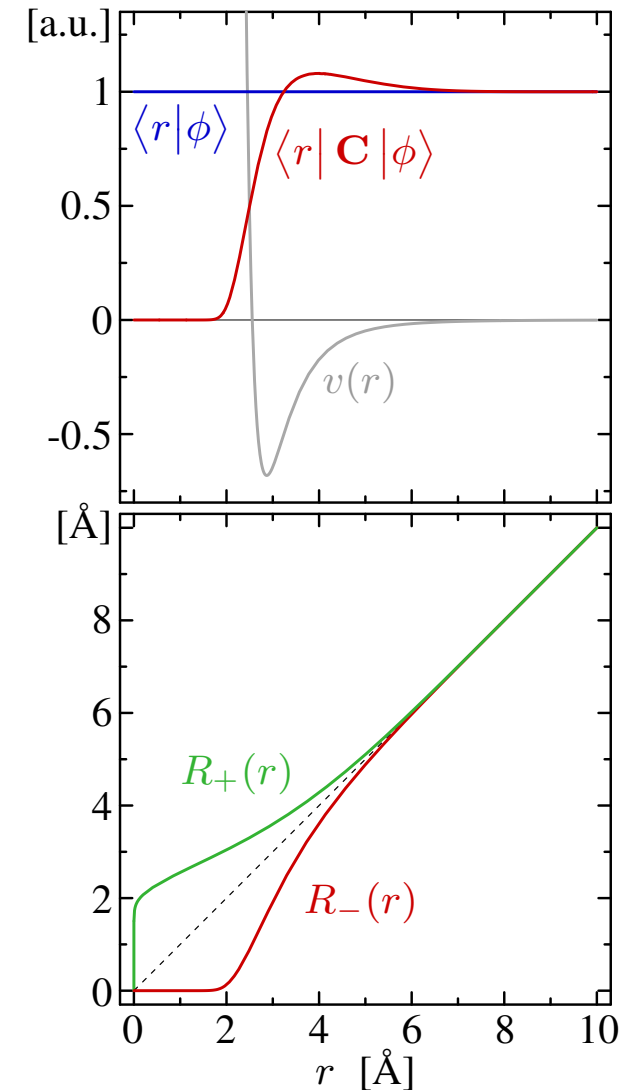
korrelierte Operatoren

$$\tilde{\mathbf{O}} = \mathbf{C}^\dagger \mathbf{O} \mathbf{C}$$

Koordinatentransformation

Korrelationsoperator wirkt wie eine normerhaltende Koordinatentransformation

$$\vec{r} \rightarrow R_{\pm}(r) \frac{\vec{r}}{r}$$



Bsp.: Lennard-Jones Pot. für ${}^4\text{He}$

Korrelierte Operatoren & Clusterentwicklung

$$\tilde{\mathbf{H}} = \mathbf{C}^\dagger \mathbf{H} \mathbf{C} = \tilde{\mathbf{H}}^{[1]} + \tilde{\mathbf{H}}^{[2]} + \tilde{\mathbf{H}}^{[3]} + \dots$$

- Beiträge jenseits der Zweiteilchenordnung vernachlässigbar, wenn die Reichweite der Korrelationen klein gegen den mittleren Teilchenabstand ist
- **Kleinheitsparameter** κ = Dichte \times Volumen des Korrelationslochs

$$\kappa \ll 1$$

Zweiteilchennäherung – C^2

$$\tilde{\mathbf{H}}^{C^2} = \tilde{\mathbf{H}}^{[1]} + \tilde{\mathbf{H}}^{[2]}$$

- geschlossene Ausdrücke in Abhängigkeit von der Korrelationsfunktion $R_+(r)$
- effektive Wechselwirkung ist **streuphasen-äquivalent** zum ursprünglichen Potential
- in komplexen Vielteilchenrechnungen leicht einsetzbar (HF, FMD, Konfigurationsm.)

$$\kappa \not\ll 1$$

Effektive Korrekturen – $C^2\rho$

- dichteabhängige Korrelationsfunktion, die mit wachsender Dichte abgeschwächt wird

$$R_+(r) \rightarrow R_+(r, \rho)$$

- ein freier Parameter, der an experimentelle Daten oder „exakte“ Rechnungen für das Vielteilchensystem angepaßt wird

Dreiteilchennäherung – C^3, \dots

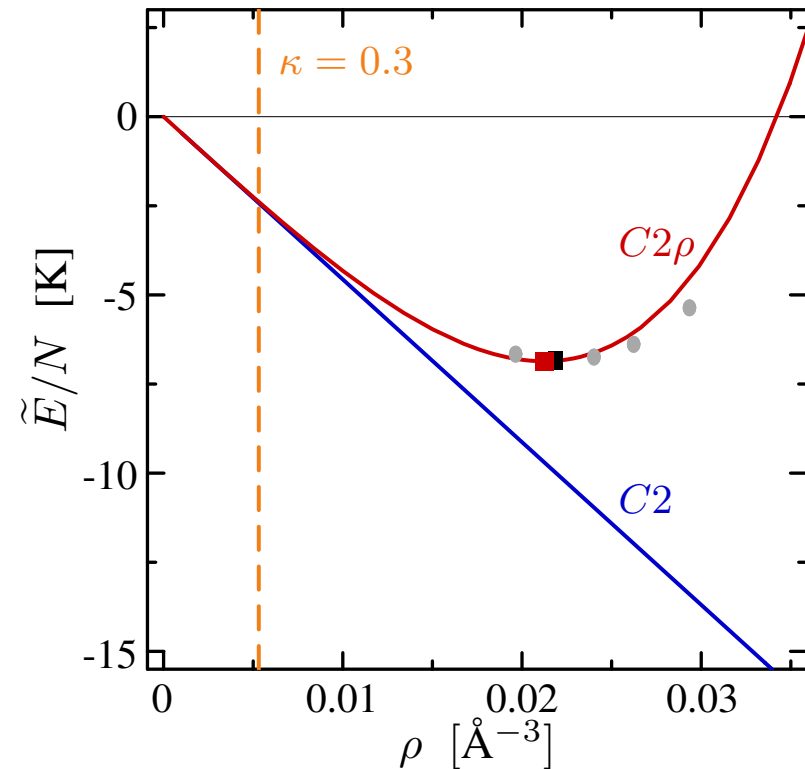
- wohldefiniert aber numerisch aufwendig

Anwendung I: Flüssiges ^4He

Zustandsgleichung der homogenen Flüssigkeit

- Lennard-Jones Potential
- unkorrelierter Vielteilchenzustand ist Produkt von konstanten Einteilchenzuständen
- Korrelator $R_+(r)$ im Zweiteilchensystem fixiert

- ✓ abstoßender Core ist vollständig **gezähmt**; System ist gebunden
- ✗ Zweiteilchennäherung liefert keine Sättigung im homogenen Bosesystem
- ✓ dichteabhängiger Korrelator erzeugt Minimum mit erwarteter Dichte, Energie und Form



- Green's-Function-Monte-Carlo Rechnung
PRB 24 (1981) 115

Anwendung I: Flüssiges ${}^4\text{He}$

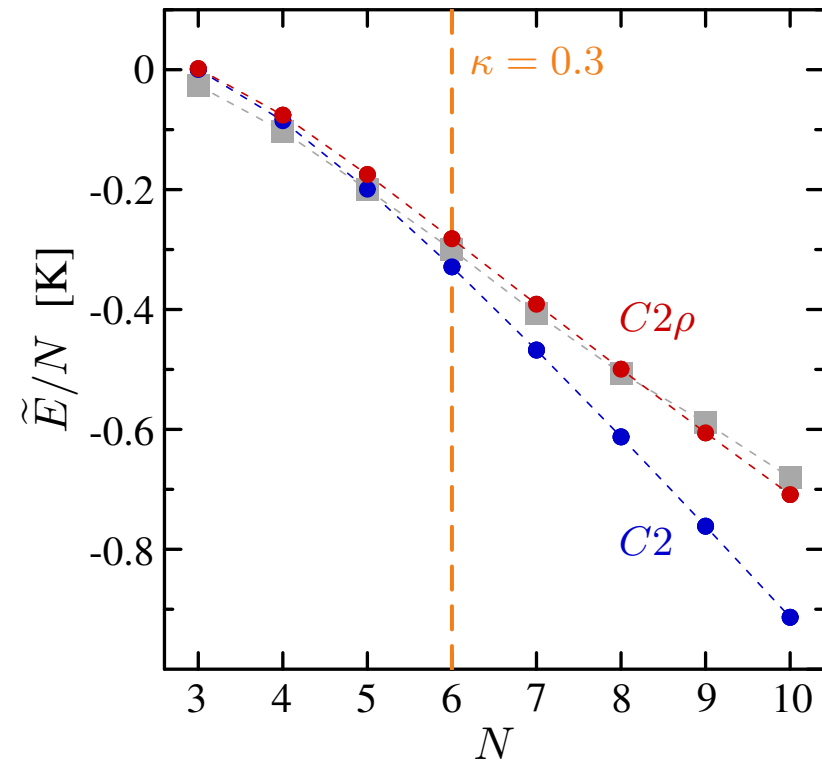
Struktur kleiner ${}^4\text{He}$ -Tröpfchen

- Korrelator und Dichteabhängigkeit im Zweiteilchensystem bzw. Flüssigkeit **fixiert**
- identische gaußförmige Einteilchenzustände mit variabler Breite

✓ Core gezähmt; Beschreibung extrem schwach gebundener ${}^4\text{He}$ -Tröpfchen möglich

✗ Zweiteilchennäherung liefert gute Beschreibung für $\kappa < 0.3$; bei größeren Dichten moderate Überbindung

✓ Dichteabhängigkeit korrigiert Überbindung und führt auf Energien in Einklang mit „exakten“ Rechnungen



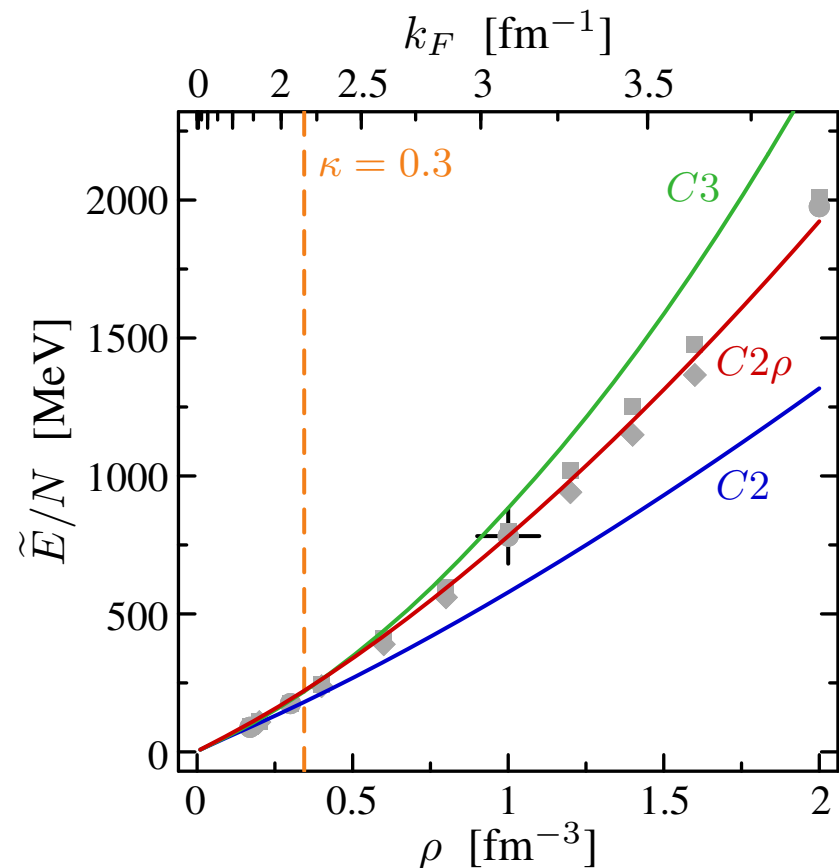
■ Variational-Monte-Carlo Rechnungen
Physica 31 (1965) 1143

Anwendung II: Homework-Problem

Zustandsgleichung von Neutronenmaterie

- Neutronenmaterie mit *Modellwechselwirkung* (Core des 1S_0 Reid-Potentials)
- unkorrelierter Zustand ist Slaterdeterminante von Impulseigenzuständen

- ✗ Zweiteilchennäherung gut für $\kappa < 0.3$; jenseits moderate Unterschätzung der Energien
- ✓ Hinzunahme des Dreiteilchenbeitrags kompensiert Unterschätzung
- ✓ dichteabhängiger Korrelator reproduziert die Zustandsgleichung im gesamten Intervall



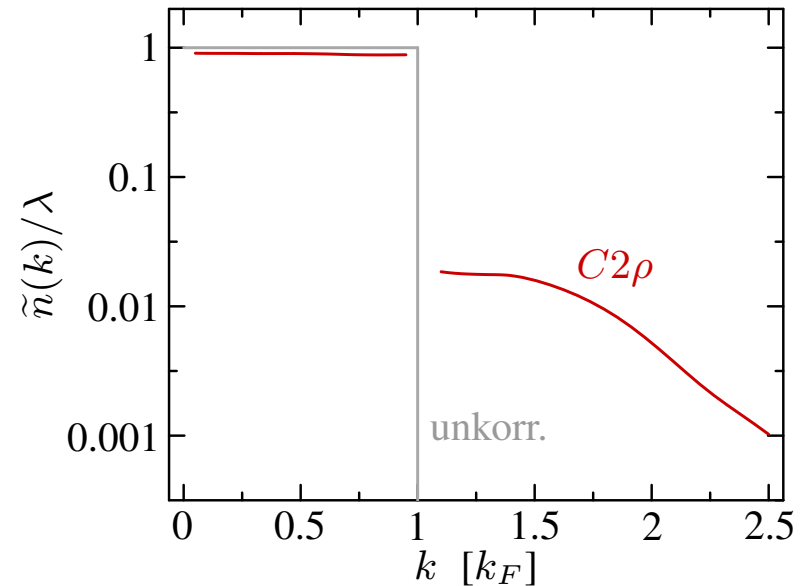
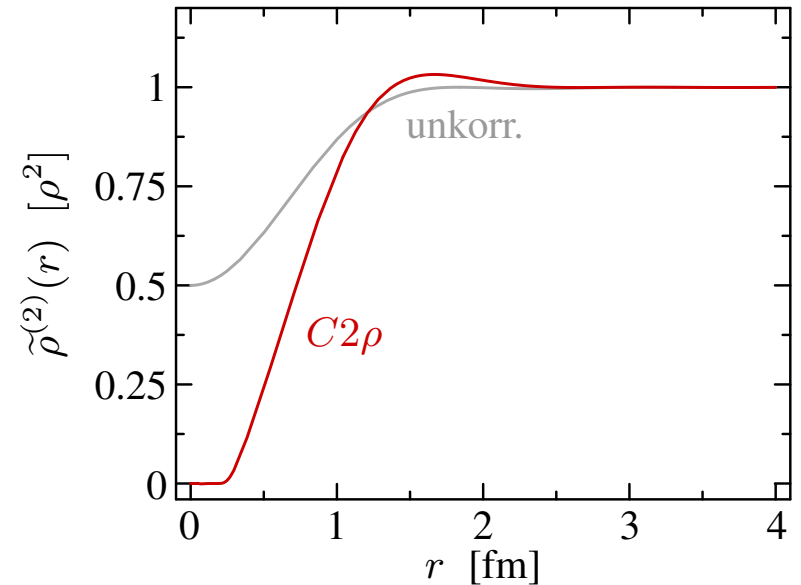
- /◆ Fermi-Hypernetted-Chain Rechnungen
PRA 16 (1977) 1258; PL 61B (1976) 393
- Variational-Monte-Carlo Rechnung
PRD 16 (1977) 3081

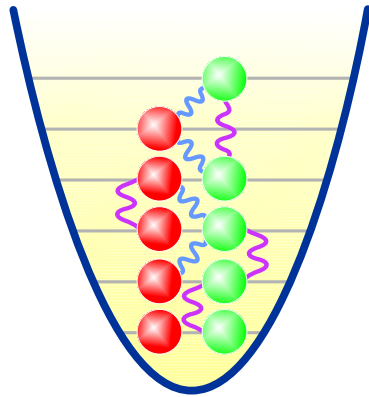
Anwendung II: Homework-Problem

Zweiteilchendichte und Besetzungszahlen

- Untersuchung beliebiger Observablen mit dichteabhängigem Korrelator möglich
- Bsp.: Zweiteilchendichte und Impulsraum-Besetzungszahlen für $\rho = 0.5 \text{ fm}^{-3}$

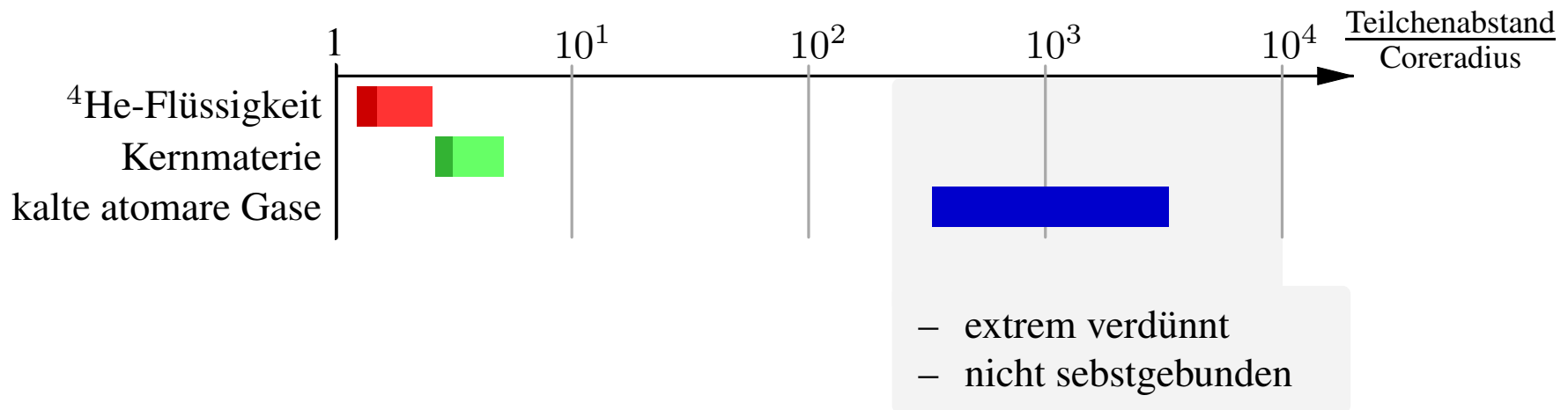
- ✓ Zweiteilchendichte $\rho^{(2)}(r)$: Korrelator generiert **Korrelationsloch**
- ✓ Besetzungszahlen $n(k)$: Korrelator erzeugt **Besetzung jenseits des Fermiimpulses**
- ✓ Normierung (Teilchenzahl) ist erhalten





Eine Effektive Kontaktwechselwirkung

*zur Beschreibung der Struktur
ultrakalter verdünnter Fermigase*



Konzept der Effektiven Kontaktwechselwirkung

System ist **verdünnt** und **kalt**:
Wellenlänge der Relativbewegung
» Reichweite der Wechselw.

nicht-selbstgebundener,
metastabiler Vielteilchen-
zustand in einem externen
Potential

eine oder mehrere
unterscheidbare Spezies mit
makroskopischer Teilchenzahl
 $N \sim 10^5 - 10^8$

Effektive Kontaktwechselwirkung

- hermitesche nichtlokale Kontaktwechselwirkung für jede Partialwelle
- Erwartungswerte des effektiven Hamiltonoperators in Zweiteilchen-Modellraumzuständen sollen das exakte Zweiteilchenspektrum für positive Energien reproduzieren

$$\mathbf{v}_l^{\text{ECI}} = \int d^3r \left| \vec{r} \right\rangle \frac{\overleftarrow{\partial}^l}{\partial r^l} g_l \delta^{(3)}(\vec{r}) \frac{\overrightarrow{\partial}^l}{\partial r^l} \left\langle \vec{r} \right|$$

$$g_l = \frac{4\pi}{m} \frac{(2l+1)}{(l!)^2} a_l^{2l+1}$$

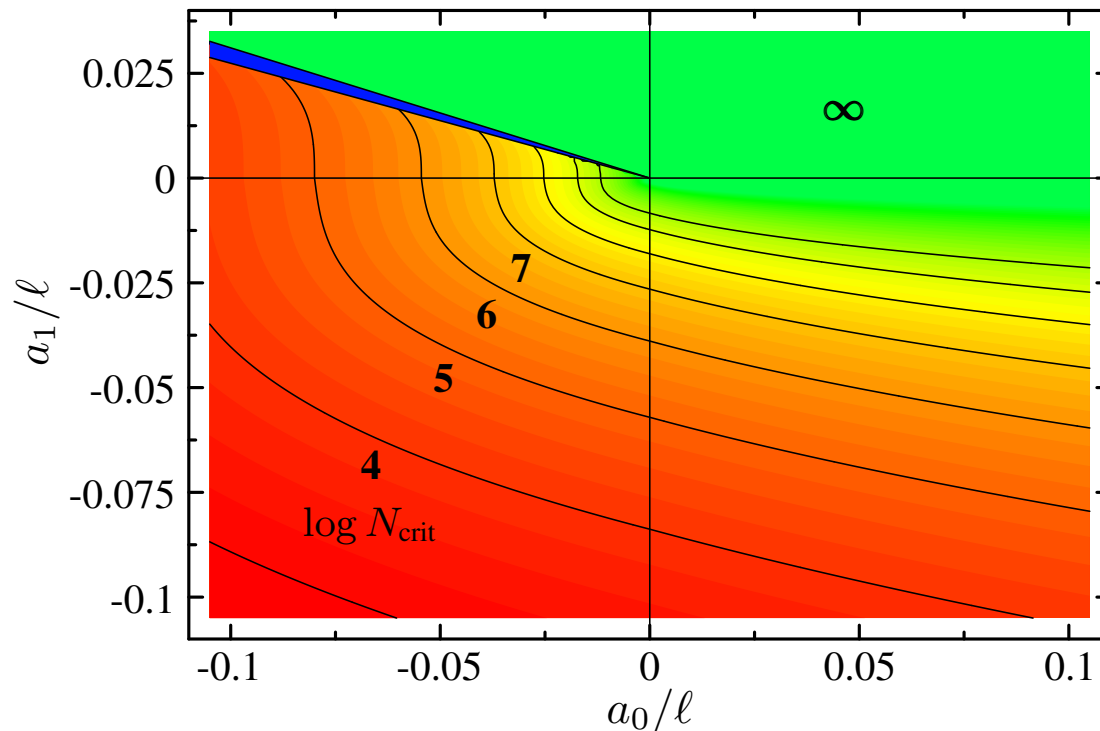
Vielteilchenproblem

- Energiedichte des inhomogenen mehrkomponentigen Fermigases in Thomas-Fermi Näherung
- Funktionalvariation bei gegebener Teilchenzahl liefert Grundzustandsdichte des Systems

Zweikomponentiges Fermigas

Mean-Field Instabilität

- für Wechselwirkungen mit negativen Streulängen kann das anziehende Mean-Field so stark werden, daß kein metastabiler Zustand niedriger Dichte existiert
- kritische bzw. maximale Teilchenzahl: $N_{\text{crit}}(a_0/\ell, a_1/\ell)$



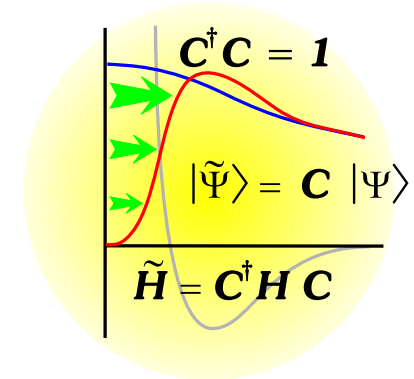
- *Kollaps*
oberhalb der kritischen Teilchenzahl kollabiert das Gas hin zu hohen Dichten
- *absolute Stabilität*
verdünntes Fermigas ist für alle Teilchenzahlen stabil
- *p-wellenstabilisierte Hochdichtephase*
Region mit hoher Dichte im Zentrum der Falle, die von der p-Wellenabstoßung stabilisiert wird

Zusammenfassung & Ausblick

Die Methode der unitären Korrelatoren

Zusammenfassung

- Die Methode der unitären Korrelatoren zählt kurzreichweitige Korrelationen durch eine normerhaltende Transformation in der Zweiteilchen-Relativkoordinate
- $\kappa < 0.3$: Zweiteilchennäherung liefert gute *ab initio* Beschreibung
- $\kappa > 0.3$: dichteabhängiger Korrelator erlaubt effektive Behandlung von Mehrteilchenkorrelationen
- *Anwendung I*: Zustandsgleichung der homogenen ${}^4\text{He}$ -Flüssigkeit und Energie kleiner ${}^4\text{He}$ -Tröpfchen
- *Anwendung II*: Homework-Problem für dichte Neutronenmaterie; Zustandsgleichung, Dichten und Besetzungszahlen

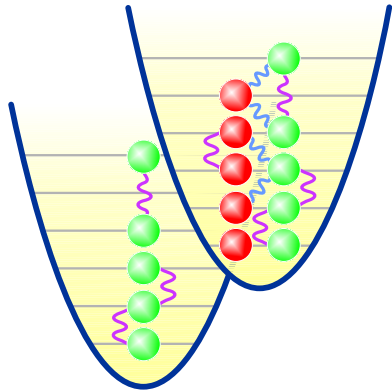


Ausblick

- Anwendung in Kernstruktur- und Dynamikrechnungen (FMD) auf Basis realistischer NN-Potentiale (z.B. Bonn A; $\kappa \approx 0.1$)
- analoge Beschreibung von Tensorkorrelationen durch Transformation im Spin- und Ortsraum

Zusammenfassung & Ausblick

Effektive Kontaktwechselwirkung



Zusammenfassung

- Beschreibung der Struktur und Stabilität ultrakalter verdünnter Fermigase in externen Potentialen in Thomas-Fermi Näherung auf Basis einer effektiven s- und p-Wellenkontaktwechselwirkung
- *einkomponentiges Fermigas*: s-Wellenwechselwirkung trägt nicht bei; p-Wellenwechselwirkung bestimmt Struktur und Stabilität
- *zweikomponentiges Fermigas*: komplexes Zusammenspiel von s- und p-Wellenwechselwirkung; neue Effekte wie absolute Stabilisierung und p-wellenstabilisierte Hochdichtephase
- p-Wellenwechselwirkung kann in verdünnten Fermigasen von großer Bedeutung sein

Ausblick

- kollektive Anregungen des verdünnten Fermigases unter Einfluß von s- und p-Wellenwechselwirkungen
- Struktur und Stabilität von Fermion-Boson Mischungen,...