Mecánica Estadística II - Curso 2019
Práctica 4: Sistemas interactuantes: método de campos cuánticos

1. **Comportamiento de baja temperatura de un gas de bosones con interacción**

   Considere el Hamiltoniano en segunda cuantificación de un sistema de bosones en interacción:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\int d^3r\psi^\dagger(\vec{r})\nabla^2\psi(\vec{r}) + \frac{1}{2}\int\int d\vec{r}\,d\vec{r}'_2\psi^\dagger(\vec{r})\psi^\dagger(\vec{r}')V(\vec{r},\vec{r}')\psi(\vec{r}')\psi(\vec{r})$$

   Como primera aproximación, a bajas temperaturas puede considerarse que los momentos son bajos, y que el momento transferido en la colisión de partículas es nulo. Bajo estas aproximaciones:

   (a) Muestre que la energía del estado fundamental es aproximadamente $E_0 \sim \frac{2\pi a\hbar^2 N^2}{mV}$, donde a es la longitud de scattering de onda s, definida como $a = \frac{m}{4\pi\hbar^2}\int V(\mathbf{r})d^3r$.

   (b) Calcule la presión del estado fundamental P_0, la velocidad del sonido $c_0^2 = \frac{1}{m}\frac{dP_0}{dn}$ y el potencial químico μ_0.

2. **Más allá de la corrección de primer orden para un gas de bosones con interacción: Teoría de Bogoliubov**

   Para obtener correcciones al caso más simple considerado en el punto anterior, podemos ir más allá tomando que la mayoría de las partículas está en el caso donde $\mathbf{p} = 0$. Considerando que existe una fracción no nula de partículas en estados con $\mathbf{p} \neq 0$, y como es necesario entonces cambiar la aproximación realizada en el punto anterior para el término de interacción entre partículas (es decir, cambiar la relación entre la longitud de scattering a y el factor asociado a la interacción entre partículas):

   (a) Escriba el operador Hamiltoniano en esta aproximación.

   (b) Para poder diagonalizar este Hamiltoniano, puede realizarse una transformación lineal de Bogoliubov de los operadores de partícula. Es decir, se proponen nuevos operadores bosónicos $b_{\mathbf{p}}$ y $b_{\mathbf{p}}^\dagger$ como combinación lineal de los anteriores, de manera que $b_{\mathbf{p}} = ua_{\mathbf{p}} + va^\dagger_{-\mathbf{p}}$, donde u y v en principio son números complejos. Con estos nuevos operadores, el Hamiltoniano toma la forma

$$\hat{H} = E_0 + \sum_{\mathbf{p}\neq 0}\epsilon(\mathbf{p})b_{\mathbf{p}}^\dagger b_{\mathbf{p}}$$

   .

   Obtenga los coeficientes de esta transformación para el Hamiltoniano encontrado en el inciso anterior. De las expresiones explícitas para E_0 y $\epsilon(\mathbf{p})$.

   (c) Calcule la energía del estado fundamental del sistema, la presión y el potencial químico en el estado fundamental.

3. **Criterio de Penrose-Onsager para la condensación** La teoría de Bogoliubov es válida para un sistema débilmente interactuante y uniforme, para el cual, a bajas temepraturas, un número macroscópico de partículas condensan en el estado de onda plana con momento nulo $\varphi_{\vec{p}=0}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}$. Sin embargo, es posible definir la condensación para sistemas con interacciones arbitrarias y/o no uniformes. En

1956 Penrose y Onsager desarrollaron un criterio general para la condensación basándose en la matriz densidad de una partícula, definida como

$$n^{(1)}(\vec{r},\vec{r}\,') = \langle \psi^\dagger(\vec{r})\psi(\vec{r}\,')\rangle, \tag{1}$$

en donde el promedio se toma sobre el estado relevante (el ground state a $T=0$ o un estado térmico a $T\neq 0$). El criterio indica que hay condensación cuando uno de los autovalores n_i de esta matriz es comparable con el número total N de partículas en el sistema. Para entender la lógica de este resultado:

(a) Muestre que $\int d\vec{r} n^{(1)}(\vec{r},\vec{r}) = N$. Muestre que la suma de los autovalores de la matriz densidad de una partícula está dada por $\sum_i n_i = N$.

(b) Muestre que la matriz densidad de una partícula puede escribirse como $\sum_i n_i\,\varphi_i(\vec{r})\varphi_i(\vec{r}\,')$, en donde $\varphi_i(\vec{r})$ son las autofunciones de la matriz densidad de una partícula.

(c) Si escribimos al operador de campo en la base de autofunciones de la matriz densidad de una partícula $\psi(\vec{r}) = \sum_i \varphi_i(\vec{r})a_i$, en donde a_i destruye una partícula en el estado $\varphi_i(\vec{r})$, ¿qué interpretación admiten los autovalores n_i?

4. **Modelo de Feynman para las excitaciones del He^4**

En la década del 50 Richard Feynman desarrolló una teoría microscópica del modelo de dos fluidos del Helio líquido. En su propuesta, la función de onda de una excitación tiene la forma $\psi = \sum_i f(\mathbf{r}_i)\Phi$, donde Φ es la función de onda del estado fundamental. Aplicando el principio variacional, puede verse que $f(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$. Para encontrar este resultado, tome el Hamiltoniano de las excitaciones como $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_i \nabla_i^2 + V - E_0$, donde V es el potencial de interacción de las partículas y E_0 es la energía del estado fundamental, de manera que $H\Phi = 0$. Para aplicar el principio variacional, puede trabajar primero con la forma $\psi = F\Phi$, y minimizar la $E = \epsilon/g$ donde $\epsilon = \int \psi^* H\psi d^N\mathbf{r}$ y g es la normalización $g = \int \psi^*\psi d^N\mathbf{r}$. Para esto, puede guiarse con el paper de Feynman "Atomic Theory in the Two-Fluid Model of Liquid Helium", Physical Review **94** (1954).

5. **Ecuación de Gross-Pitaevskii**

La teoría de Bogoliubov se aplica sólo a sistemas homogéneos (uniformes). Para lidiar con sistemas inhomogéneos se utiliza una ecuación para la función de onda del condensado que fue descubierta independientemente por Gross y Pitaevskii en 1961. Considere el Hamiltoniano en segunda cuantificación para un sistema de bosones interactuantes en presencia de un campo externo $V_{\rm ext}$:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\int d\vec{r}\psi^\dagger(\vec{r})\nabla^2\psi(\vec{r}) + \frac{1}{2}\int\int d\vec{r}d\vec{r}\,'\psi^\dagger(\vec{r})\psi^\dagger(\vec{r}\,')V(\vec{r}-\vec{r}\,')\psi(\vec{r})\psi(\vec{r}\,') + \int d\vec{r}\, V_{\rm ext}(\vec{r})\psi^\dagger(\vec{r})\psi(\vec{r}),$$

(a) Utilizando las relaciones de conmutación de los operadores de campo, muestre que, en la representación de Heisenberg, la ecuación de evolución del campo es

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t) = \left[-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + V_{\rm ext}(\vec{r},t) + \int \psi^\dagger(\vec{r}\,',t)\; V(\vec{r}-\vec{r}\,')\psi(\vec{r})\, d\vec{r}\,'\right]\psi(\vec{r},t). \tag{2}$$

(b) Utilizando la prescripción de Bogoliubov, reemplace en la ecuación anterior al operador de campo $\psi(\vec{r})$ por una función compleja $\psi_0(\vec{r}) = \sqrt{N_0}\varphi_0(\vec{r})$, en donde $\varphi_0(\vec{r})$ es la autofunción correspondiente al autovalor macroscópico de la matriz densidad de una partícula. De esta manera es posible obtener la ecuación de Gross-Pitaevskii dependiente del tiempo:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_0(\vec{r},t) = \left[-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + V_{\rm ext}(\vec{r},t) + g|\psi_0(\vec{r},t)|^2\right]\psi_0(\vec{r},t), \tag{3}$$

en donde $g = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}$, y a es la longitud de scattering de onda s del potencial de interacción. *Describa detalladamente las aproximaciones que se deben hacer sobre el término de interacción para llegar a este resultado.*

(c) A partir del hecho de que existe un estado macroscópicamente ocupado, muestre que en condiciones estacionarias la dependencia temporal del condensado viene dada por

$$\psi_0(r,t) = \langle \psi(r,t) \rangle = e^{-i\mu t/\hbar}\psi_0(r), \tag{4}$$

en donde $\mu = \frac{\partial E}{\partial N}$ es el potencial químico. Reemplace esta dependencia temporal estacionaria en la ecuación de Gross-Pitaevskii dependiente del tiempo para obtener la ecuación independiente del tiempo,

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{\text{ext}}(\vec{r},t) + g|\psi_0(\vec{r})|^2 \right] \psi_0(\vec{r}) = \mu \psi_0(\vec{r}). \tag{5}$$

(d) A partir de la ecuación dependiente del tiempo, muestre que la densidad de partículas $n(\vec{r},t) = |\psi_0(\vec{r},t)|^2$ obedece una ecuación de continuidad

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0, \tag{6}$$

en donde la corriente viene dada por $\vec{j}(\vec{r},t) = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi_0^* \nabla \psi_0 - \psi_0 \nabla \psi_0^*\right)$. A partir de esto muestre que puede escribirse $\vec{j}(\vec{r},t) = n(\vec{r},t)\vec{v}_s(\vec{r},t)$, en donde la velocidad del superfluido viene dada por $\vec{v}_s(\vec{r},t) = \frac{\hbar}{m}\nabla S(\vec{r},t)$, siendo $S(\vec{r},t)$ la fase de la función compleja $\psi_0(\vec{r},t)$. A partir de la ecuación de continuidad muestre que la ecuación de Gross-Pitaevskii conserva el número de partículas $N = \int d\vec{r} n(\vec{r},t)$.

(e) Muestre que la ecuación de Gross-Pitaevskii conserva la energía

$$E = \int \left(\frac{\hbar^2}{2m}|\nabla \psi_0|^2 + V_{\text{ext}}(\vec{r})|\psi_0|^2 + \frac{g}{2}|\psi_0|^4 \right). \tag{7}$$

(f) Muestre que el flujo del superfluido es irrotacional: $\vec{\nabla} \times \vec{v}_s = 0$. Compare con un cuerpo rígido para el cual $\vec{v} = \vec{\Omega} \times \vec{r}$, en donde $\vec{\Omega}$ es la velocidad angular.

6. **Vórtices en un superfluido**

Uno de los grandes avances de la teoría del superfluido fue la propuesta de la existencia de vórtices con circulación cuantizada. Para estudiar los vórtices en un superfluido vamos a considerar al superfluido dentro de una cilindro de longitud L y radio R. Como solución de la ecuación de Gross-Pitaevskii en este caso vamos a proponer el ansatz $\psi_0(\vec{r}) = e^{is\varphi}|psi_0(r)|$, en donde φ y r son las coordinadas cilíndricas angular y radial respectivamente.

(a) Muestre que s tiene que ser un entero para que el ansatz esté bien definido.

(b) Muestre que el campo de velocidades del vórtice viene dado por $\vec{v}_s(r,\varphi) = \frac{\hbar}{m}\frac{s}{r}\hat{\varphi}$. ¿Cuánto vale la velocidad del superfluido muy lejos del centro del vórtice?

(c) Muestre que la circulación de la velocidad $\oint \vec{v}_s \cdot d\vec{l}$ está cuantizada en cuantos de $\frac{h}{m}$.

(d) Utilizando el ansatz, escriba la ecuación de Gross-Pitaevskii en coordenadas cilíndricas. Ahora realice el cambio de variables $|\psi_0(r)| = \sqrt{n}f(\eta)$, en donde $n = N/V$ es la densidad total del sistema y $\eta = r/\xi$, siendo $\xi = \frac{\hbar}{\sqrt{2mgn}}$ el *healing length* del condensado. Encuentre la ecuación que obedece $f_s(\eta)$. ¿Qué constraint es necesario poner sobre $f_s(\infty)$?

(e) Utilizando un software adecuado, grafique la función $f_s(\eta)$ para diferentes valores de s. Discuta los límites $\eta \to 0$ y $\eta \to \infty$.

(f) Proponga el ansatz de Fetter para $f_1(\eta) = \frac{\eta}{\sqrt{\eta^2+1}}$ y calcule la energía por unidad de línea del vórtice. Puede ayudarse siguiendo los pasos del paper de Fetter, "Vortices in an Imperfect Bose Gas I. The Condensate", Physical Review **138** (1965).

7. **Comportamiento de baja temperatura de un gas de Fermi imperfecto**

Considere un gas de fermiones con interacciones, con un Hamiltoniano dado por

$$\hat{H} = \sum_{\vec{p},\sigma} \frac{p^2}{2m} a^\dagger_{\vec{p},\sigma} a_{\vec{p},\sigma} + \frac{1}{2} {\sum}' V^{\vec{p}_1'\sigma_1',\vec{p}_2'\sigma_2'}_{\vec{p}_1\sigma_1,\vec{p}_2\sigma_2'} a^\dagger_{\vec{p}_1'\sigma_1'} a^\dagger_{\vec{p}_2'\sigma_2'} a_{\vec{p}_1\sigma_1} a_{\vec{p}_2\sigma_2}, \tag{8}$$

en donde la suma del segundo término se extiende sobre todas las combinaciones de índices que respetan las leyes de conservación de momento y spin.

(a) Encuentre la corrección a primer orden de la energía.

(b) Calcule la corrección a segundo orden de la energía.

(c) Obtenga a partir de lo anterior, la energía, presión y velocidad del sonido del estado fundamental.