Uniwersytet Jagielloński w Krakowie

Wydział Fizyki, Astronomii
i Informatyki Stosowanej

Instytut Fizyki im. Mariana Smoluchowskiego

Andrzej Syrwid

Uniwersalne relacje w układach fermionowych

praca licencjacka pod kierunkiem
prof. dr. hab. Krzysztofa Sachy

Kraków 2013

Wydział Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej
Uniwersytet Jagielloński

Oświadczenie

Ja niżej podpisany Andrzej Jan Syrwid (nr indeksu: 1063414) student Wydziału Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej Uniwersytetu Jagiellońskiego kierunku fizyka, oświadczam, że przedłożona przeze mnie praca licencjacka pt. *Uniwersalne relacje w układach fermionowych* przedstawia wyniki badań wykonanych przeze mnie osobiście, pod kierunkiem prof. dr. hab. Krzysztofa Sachy. Pracę napisałem samodzielnie.
Oświadczam, że moja praca dyplomowa została opracowana zgodnie z Ustawą o prawie autorskim i prawach pokrewnych z dnia 4 lutego 1994 r. (Dziennik Ustaw 1994 nr 24 poz. 83 wraz z późniejszymi zmianami).
Jestem świadom, że niezgodność niniejszego oświadczenia z prawdą ujawniona w dowolnym czasie, niezależnie od skutków prawnych wynikających z ww. ustawy, może spowodować unieważnienie tytułu nabytego na podstawie tej pracy.

Kraków, dnia ....

podpis studenta

Wstęp

Ultrazimne gazy atomowe to kwantowe układy wielu ciał dające wręcz niewyobrażalne możliwości badania szerokiej gamy zagadnień, począwszy od zjawisk fizyki ciała stałego poprzez komputery kwantowe, a skończywszy na kosmologii. W związku z tym stały się one niezwykle ważnym i zarazem interesującym obiektem badań współczesnej fizyki, zarówno teoretycznej jak i eksperymentalnej.

W niniejszej pracy przedstawiono, zaproponowane przez Shina Tana [1], [2], nowatorskie podejście do analitycznego rozwiązywania problemów fizycznych w układach oddziałujących kontaktowo fermionów. Jego efektem było wyprowadzenie niezwykle ważnych, uniwersalnych w tych systemach, matematycznych zależności. Relacje te doczekały się już potwierdzenia eksperymentalnego [3], [4], [5].

Praca składa się ze wstępu, czterech rozdziałów, podsumowania, dodatków oraz bibliografii.

Pierwszy rozdział zawiera omówienie najważniejszych zagadnień z fizyki kwantowej, niezbędnych do zrozumienia dalszej części pracy. Zaprezentowano w nim przede wszystkim metodę pseudopotencjału, wyprowadzenie funkcji falowej przy oddziaływaniu kontaktowym oraz podstawy formalizmu drugiej kwantyzacji dla fermionów.

Rozdziały drugi i trzeci zawierają szczegółowe wyprowadzenia własności dystrybucji $\Lambda(\vec{k})$ oraz $L(\vec{k})$, jak również ich transformat Fouriera $\lambda(\vec{r})$ i $l(\vec{r})$. W rozdziale trzecim wprowadzono także pojęcie selektorów krótkiego zasięgu i zdefiniowano selektor $\eta(\vec{k})$.

W rozdziale czwartym sformułowano twierdzenie o energii, wraz ze szczegółowym dowodem. Zdefiniowano również tzw. „kontakt” $\mathcal{C}$ i przedstawiono jedną z fizycznych konsekwencji twierdzenia o energii.

Dodatek A. zawiera wyprowadzenie funkcji Greena dla równania Helmholtza, a dodatek B. wyprowadzone własności dystrybucji $\Lambda(\vec{k})$, $L(\vec{k})$, $\lambda(\vec{r})$, $l(\vec{r})$ i selektorów krótkiego zasięgu.

W bibliografii zastosowano kolejność według cytowań w pracy.

Na zakończenie składam serdeczne podziękowanie prof. dr. hab. Krzysztofowi Sacha za okazaną pomoc i niezmienną życzliwość w trakcie powstawania kolejnych etapów pracy.

Spis treści

Rozdział 1

Wprowadzenie teoretyczne

1.1 Kwantowa teoria rozpraszania

Przeanalizujmy wzajemne oddziaływanie dwóch atomów, o masach m_1 i m_2, opisane potencjałem $V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ [6], [7], [8]. Niezależne od czasu równanie Schrödingera dla takiego układu jest następujące

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla^2_{\vec{r}_1} - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla^2_{\vec{r}_2} + V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\right)\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2). \tag{1.1}$$

Możemy rozseparować ruch środka masy oraz ruch względny wprowadzając nowe zmienne

$$\vec{R} = \frac{m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2}{m_1 + m_2}, \quad \vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2, \quad M = m_1 + m_2,$$

$$\vec{r}_1 = \vec{R} + \frac{m_2}{M}\vec{r}, \quad \vec{r}_2 = \vec{R} - \frac{m_1}{M}\vec{r}, \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{M}.$$

Mamy tutaj $\vec{R} = (X, Y, Z)$, $\vec{r} = (x, y, z)$, $\vec{r}_i = (x_i, y_i, z_i)$ skąd otrzymujemy

$$\frac{\partial}{\partial x_i} = \frac{\partial X}{\partial x_i}\frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial x}{\partial x_i}\frac{\partial}{\partial x} = \frac{m_i}{M}\frac{\partial}{\partial X} - (-1)^i\frac{\partial}{\partial x}, \quad i = 1, 2,$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} = \left(\frac{m_i}{M}\frac{\partial}{\partial X} - (-1)^i\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 = \left(\frac{m_i}{M}\right)^2\frac{\partial^2}{\partial X^2} - 2\frac{(-1)^i m_i}{M}\frac{\partial^2}{\partial X \partial x} + \frac{\partial^2}{\partial^2 x}, \quad i = 1, 2,$$

$$\frac{1}{m_1}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{1}{m_2}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} = \frac{1}{M}\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{1}{\mu}\frac{\partial^2}{\partial^2 x},$$

i analogicznie dla pozostałych zmiennych. Funkcja falowa $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ spełniająca równanie Schrödingera (1.1) separuje się na część zależną od ruchu środka masy $\varphi(\vec{R})$ oraz część związaną z ruchem względnym $\psi(\vec{r})$. Równanie Schrödingera w nowych zmiennych ma postać

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2_{\vec{R}} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2_{\vec{r}} + V(\vec{r})\right)\varphi(\vec{R})\psi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{R})\psi(\vec{r}). \tag{1.2}$$

Interesujący nas ruch względny jest opisywany przez

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2_{\vec{r}} + V(\vec{r})\right)\psi(\vec{r}) = E_r\psi(\vec{r}), \tag{1.3}$$

gdzie E_r jest energią ruchu względnego. W tego typu problemach zakłada się energię rozpraszania i szuka rozwiązania $\psi(\vec{r})$ przy konkretnych, zadanych warunkach brzegowych. Biorąc $E_r = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$ otrzymujemy

$$\left(\nabla^2_{\vec{r}} + k^2\right)\psi(\vec{r}) = \frac{2\mu}{\hbar^2}V(\vec{r})\psi(\vec{r}). \tag{1.4}$$

Rozwiązanie powyższego równania możemy zapisać w następującej postaci

$$\psi(\vec{r}) = \psi_0(\vec{r}) + \frac{2\mu}{\hbar^2}\int \mathrm{d}^3r' G(\vec{r}-\vec{r}\,')V(\vec{r}\,')\psi(\vec{r}\,'), \tag{1.5}$$

gdzie $G(\vec{r}-\vec{r}\,')$ jest funkcją Greena równania Helmholtza tj. zachodzi równość $(\nabla^2_{\vec{r}} + k^2)\, G(\vec{r}-\vec{r}\,') = \delta(\vec{r}-\vec{r}\,')$, a $\psi_0(\vec{r})$ to fala padająca, spełniająca równanie $(\nabla^2_{\vec{r}} + k^2)\,\psi_0(\vec{r}) = 0$. Zakładamy, że ma ona postać fali płaskiej tzn. $\psi_0(\vec{r}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}$. Chcemy by nasze rozwiązanie dla $r \to \infty$ miało postać fali kulistej rozchodzącej się z centrum rozpraszania. Przy takim warunku funkcja Greena przyjmuje postać (wyprowadzenie znaleźć można w dodatkach)

$$G(\vec{r}-\vec{r}\,') = -\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|\vec{r}-\vec{r}\,'|}}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}\,'|}. \tag{1.6}$$

Wstawiając funkcję Greena (1.6) do (1.5) otrzymujemy

$$\psi(\vec{r}) = \psi_0(\vec{r}) - \frac{2\mu}{4\pi\hbar^2}\int \mathrm{d}^3r' \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|\vec{r}-\vec{r}\,'|}}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}V(\vec{r}\,')\psi(\vec{r}\,'). \tag{1.7}$$

Załóżmy, że potencjał $V(\vec{r}) \to 0$ przy $r \to \infty$ szybciej niż r^{-3} - rozważamy potencjały krótkozasięgowe. Całkowanie dla potencjałów o skończonym zasięgu r_0 przebiega efektywnie po $r' < r_0$. Rozważmy $\psi(\vec{r} \to \infty)$. W tym celu wykonujemy następujące rozwinięcie ($r \gg r'$)

$$|\vec{r}-\vec{r}\,'| = \sqrt{r^2 - 2\vec{r}\cdot\vec{r}\,' + r'^2} \approx r - \frac{\vec{r}}{r}\cdot\vec{r}\,' = r - \hat{r}\cdot\vec{r}\,', \quad r \gg r'.$$

Wstawiając powyższe rozwinięcie do (1.7) dostajemy asymptotyczne wyrażenie na $\psi(\vec{r})$

$$\psi(\vec{r}) \approx \psi_0(\vec{r}) + \mathcal{A}_k(\hat{r})\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}, \tag{1.8}$$

gdzie

$$\mathcal{A}_k(\hat{r}) = -\frac{2\mu}{4\pi\hbar^2}\int \mathrm{d}^3r' \mathrm{e}^{\mathrm{i}k\hat{r}\cdot\vec{r}\,'}V(\vec{r}\,')\psi(\vec{r}\,'), \tag{1.9}$$

to tak zwana amplituda rozpraszania.

Jeśli rozpraszanie zachodzi przy bardzo niskich energiach, to amplituda rozpraszania staje się niezależna od $\hat{r}$. Dobrym przykładem jest tutaj kondensacja Bosego-Einsteina. Energia atomów w takim przypadku jest rzędu $\mathrm{k}_B T$ w zwiazku z czym $kr_0 \ll 1$. W granicy $k \to 0$ otrzymujemy

$$\mathcal{A}_{k\to 0}(\hat{r}) = -\frac{2\mu}{4\pi\hbar^2}\int \mathrm{d}^3r' V(\vec{r}\,')\psi(\vec{r}\,') = -a. \tag{1.10}$$

Widzimy zatem, że dla niskich energii asymptotyczna fala rozproszona jest sferycznie symetryczna nawet gdy potencjał $V(\vec{r})$ nie wykazuje symetrii sferycznej. W takim przypadku mówimy o rozpraszaniu typu ***s*** - rozpraszanie zachodzi tylko gdy moment pędu ruchu względnego wynosi $\hbar l = 0$.

Warto zauważyć, że r_0 jest tym samym co a tylko gdy mamy do czynienia z rozpraszaniem na sferycznej nieskończonej studni potencjału, gdzie $r_0 = a$.

1.2 Modelowy pseudopotencjał

Jeśli zderzenia są niskoenergetyczne - $\mathcal{A}_k(\hat{r}) \to -a$ (czyli amplituda rozpraszania jest niezależna od kierunku rozpraszania) - to pełna informacja o oddziaływaniu zawarta jest w dlugości rozpraszania a. W takim wypadku nieistotna jest dokładna postać potencjału $V(\vec{r})$. W zasadzie możemy przyjąć zupełnie dowolny potencjał $V'(\vec{r})$ jeśli tylko w wyniku zamiany $V \to V'$ długość rozpraszania się nie zmieni - tzn. jeśli zachodzi

$$\frac{2\mu}{4\pi\hbar^2}\int \mathrm{d}^3r' V(\vec{r}\,')\psi(\vec{r}\,') = \frac{2\mu}{4\pi\hbar^2}\int \mathrm{d}^3r' V'(\vec{r}\,')\psi(\vec{r}\,') = a.$$

Najprostszym potencjałem o tej własności jest

$$V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = g_0\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2). \tag{1.11}$$

Stosując przybliżenie Borna w (1.9) - podstawiamy $\psi(\vec{r}) = \psi_0(\vec{r}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}$ - otrzymujemy

$$\mathcal{A}_{k\to 0}(\hat{r}) = -\frac{2\mu}{4\pi\hbar^2}g_0 = -a, \tag{1.12}$$

a stąd

$$g_0 = \frac{4\pi\hbar^2 a}{2\mu} = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}, \tag{1.13}$$

gdzie przyjęto $m_1 = m_2 = m \Longrightarrow \mu = \frac{m}{2}$.

W przypadku gdy dla $r = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \approx 0$, funkcja falowa $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \approx \chi(\vec{r}_1 + \vec{r}_2)r^{-1} + f(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$, gdzie $\chi(\vec{r}_1 + \vec{r}_2)$ jest funkcją środka masy, a $f(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ to część regularna w $r = 0$, element macierzowy naszego potencjału $\langle \vec{r}_1, \vec{r}_2|V|\psi\rangle$ nie jest dobrze określony. W związku z tym problemem wprowadzamy pseudopotencjał [2], [7]

$$V(\vec{r}) = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}\delta(\vec{r})\frac{\partial}{\partial r}r. \tag{1.14}$$

W przypadku gdy $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ jest regularna w $r = 0$ otrzymujemy

$$\langle \vec{r}_1, \vec{r}_2|V|\psi\rangle = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}\delta(\vec{r})\left[r\frac{\partial\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)}{\partial r} + \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\right] = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}\delta(\vec{r})\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2),$$

czyli nie ma żadnej zmiany. Dla członu nieregularnego $\chi(\vec{r}_1 + \vec{r}_2)r^{-1}$ otrzymujemy

$$\frac{\partial}{\partial r}\left[r\frac{\chi(\vec{r}_1 + \vec{r}_2)}{r}\right] = 0.$$

Znak długości rozpraszania a charakteryzuje rodzaj oddziaływania. Oddziaływania pomiędzy atomami, dla których $a > 0$ są odpychające, a te dla których $a < 0$ przyciągające.

1.3 Rozkład na fale parcjalne

Zapiszmy równanie Schrödingera dla cząstki swobodnej w zmiennych kartezjańskich oraz w zmiennych sferycznych

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \tag{1.15}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}). \tag{1.16}$$

Rozwiązanie równania (1.15), po rozseparowaniu $\psi(\vec{r}) = \psi_x(x)\psi_y(y)\psi_z(z)$, jest natychmiastowe ($k^2 = 2\mu E/\hbar^2$)

$$\psi(\vec{r}) \sim \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}. \tag{1.17}$$

Wyrażenie (1.16) rozwiązujemy separując funkcję falową na część radialną i część kątową $\psi_l^m(\vec{r}) = R_l(r)Y_l^m(\theta,\varphi)$. Warto tutaj dodać, że

$$\hat{L}^2 Y_l^m(\theta,\varphi) = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] Y_l^m(\theta,\varphi) = \hbar^2 l(l+1)Y_l^m(\theta,\varphi), \tag{1.18}$$

co pozwala na zapisanie (1.16) w prostszej postaci

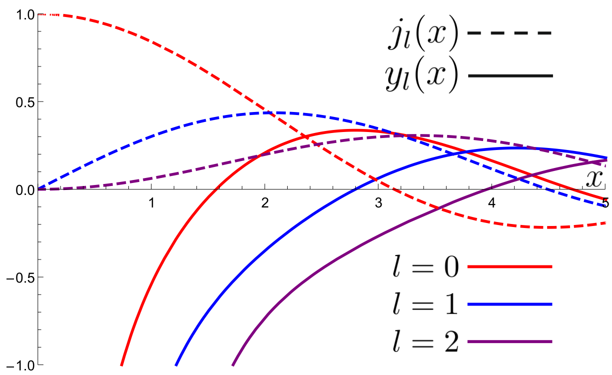
$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] R_l(r) = ER_l(r). \tag{1.19}$$

Otrzymaliśmy w ten sposób radialne równanie Schrödingera dla cząstki swobodnej. Jego rozwiązaniami są sferyczne funkcje Bessel'a $j_l(kr)$ i $y_l(kr)$. Dla funkcji tych zachodzą następujące wzory rekurencyjne [9]

$$j_l(x) = x^l \left(-\frac{1}{x}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^l \frac{\sin x}{x},$$

$$y_l(x) = -x^l \left(-\frac{1}{x}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^l \frac{\cos x}{x}.$$

Chcemy mieć rozwiązania regularne w $r = 0$, zatem musimy odrzucić funkcje $y_l(kr)$ (patrz wyk. 1). Rozwiązanie (1.16) możemy więc zapisać w postaci następującej sumy



Wykres 1. Sferyczne funkcje Bessel'a $j_l(kr)$ i $y_l(kr)$ dla $l = 0, 1, 2$.

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} C_{lm} j_l(kr) Y_l^m(\theta,\varphi). \tag{1.20}$$

Powróćmy do problemu rozpraszania. Przy założeniu niezależności rozpraszania od φ (co jest słuszne dla potencjałów sferycznie symetrycznych) - symetria cylindryczna dookoła osi wyznaczanej przez $\vec{k}$ - otrzymujemy

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} C_l j_l(kr) P_l(\cos\theta), \tag{1.21}$$

gdzie $P_l(\cos\theta)$ jest wielomianem Legendre'a. Łącząc wyrażenia (1.17) i (1.21) dostajemy

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty} C_l j_l(kr) P_l(\cos\theta). \tag{1.22}$$

Widzimy zatem, że fala padająca jest superpozycją stanów o wszystkich wartościach momentu pędu. Korzystając z relacji [10]

$$\int_{-1}^{1} P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta) \mathrm{d}(\cos\theta) = \frac{2\delta_{ll'}}{2l+1},$$

$$\int_{-1}^{1} P_l(\cos\theta) \mathrm{e}^{\mathrm{i}kr\cos\theta} \mathrm{d}(\cos\theta) = 2\mathrm{i}^l j_l(kr),$$

otrzymujemy współczynniki C_l

$$C_l = (2l+1)\mathrm{i}^l.$$

Zatem równanie (1.22) przyjmuje postać

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\mathrm{i}^l j_l(kr)P_l(\cos\theta). \tag{1.23}$$

Dla dużych r mamy $j_l(kr) \to \frac{1}{kr}\sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right) = \frac{1}{2\mathrm{i}kr}\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-\pi l/2)} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kr-\pi l/2)}\right)$ [9], skąd

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}} \approx \frac{1}{2\mathrm{i}kr}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\mathrm{i}^l\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-\pi l/2)} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kr-\pi l/2)}\right)P_l(\cos\theta). \tag{1.24}$$

Jeśli włączymy potencjał to jedyną możliwą zmianą funkcji falowej, w rejonach gdzie $V \to 0$, może być jej przesunięcie w fazie (postać funkcyjna nie ulega zmianie)

$$\sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right) \to \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l(k)\right).$$

Dla pełnej funkcji falowej (1.8) możemy napisać analogicznie

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{2\mathrm{i}kr}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\mathrm{i}^l\Delta_l(k)\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-\pi l/2+\delta_l(k))} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kr-\pi l/2+\delta_l(k))}\right)P_l(\cos\theta), \tag{1.25}$$

gdzie $\Delta_l(k)$ to pewna stała. W związku z tym, że potencjał ma wpływ jedynie na falę wychodzącą, to dla fali wchodzącej do centrum rozpraszania przesunięcie fazowe musi znikać. Warunek ten wyznacza stałą $\Delta_l(k) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l(k)}$. Zauważając jeszcze, że $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi l/2} = (-\mathrm{i})^l$ rozpisujemy (1.25)

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{2\mathrm{i}kr}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\mathrm{i}^l\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-\pi l/2+2\delta_l(k))} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kr-\pi l/2)}\right)P_l(\cos\theta) =$$

$$= \frac{1}{2\mathrm{i}kr}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\mathrm{i}^l\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-\pi l/2+2\delta_l(k))} - \mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-\pi l/2)} + \mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-\pi l/2)} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kr-\pi l/2)}\right)P_l(\cos\theta) =$$

$$= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}} + \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\delta_l(k)}-1}{2\mathrm{i}k}P_l(\cos\theta).$$

Porównując powyższe wyrażenie z postacią (1.8) otrzymujemy

$$\mathcal{A}_k(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\delta_l(k)}-1}{2\mathrm{i}k}P_l(\cos\theta). \tag{1.26}$$

W przypadku niskich energii, gdy $\mathcal{A}_k = -a$ (mamy wtedy $l = 0$), dostajemy

$$\mathcal{A}_k = -a = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\delta_0(k)}-1}{2\mathrm{i}k} \approx \frac{\delta_0(k)}{k},$$

$$\delta_0(k) = -ka. \tag{1.27}$$

Dla fali $\boldsymbol{s}$ równanie (1.25) przyjmuje zatem postać

$$\psi_s(\vec{r}) = \psi_s(r) = \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}}{kr}\sin(kr - ka). \tag{1.28}$$

Stąd otrzymujemy warunek znikania fali $\boldsymbol{s}$

$$\psi_s(a) = 0. \tag{1.29}$$

1.4 Oddziaływanie kontaktowe - s

Mówimy, że dwie nierelatywistyczne cząstki w trzech wymiarach oddziałują kontaktowo gdy nie ma żadnej bezpośredniej interakcji, jeśli ich wzajemna odległość $r \neq 0$ lub/i moment pędu w ruchu względnym $\hbar l \neq 0$. Ponadto składowa funkcji falowej ruchu względnego odpowiadająca $l = 0$ powinna spełniać proste liniowe warunki brzegowe dla $r = 0$ [1].

Rozważmy jeszcze raz ruch względny dwóch cząstek/atomów o masach m_1, m_2. Zapiszmy dla takiego układu radialne równanie Schrödingera

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(-\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}+\frac{l(l+1)}{r^2}\right)\psi_l(\vec{r}) = E_r\psi_l(\vec{r}). \tag{1.30}$$

Pełna funkcja falowa jest sumą $\psi(\vec{r}) = \sum_{l=0}^{\infty}\psi_l(\vec{r})$. Dla malych E i relatywnie niewielkich r możemy pominąć wyraz zawierający energię

$$-\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}\psi_l(\vec{r}) + \frac{l(l+1)}{r^2}\psi_l(\vec{r}) = 0. \tag{1.31}$$

Rozwiązaniem tego równania, co łatwo sprawdzić, są funkcje

$$\psi_l(\vec{r}) = A_l(\hat{r})r^l + B_l(\hat{r})r^{-l-1}. \tag{1.32}$$

Rozpatrujemy jedynie fale $\boldsymbol{s}$ zatem współczynniki $A_l(\hat{r}) = B_l(\hat{r}) = 0,\ l \neq 0$. Z warunku znikania fal $\boldsymbol{s}$ w $r = a$ (1.29) otrzymujemy liniowy warunek brzegowy

$$A_0 + \frac{B_0}{a} = 0, \tag{1.33}$$

gdzie A_0 i B_0 nie zależą już od kątów ponieważ fale $\boldsymbol{s}$ są sferycznie symetryczne. Zakładamy tutaj, że $a \neq 0$. Łącząc równania (1.32) i (1.33) oraz wprowadzając zależność od czasu otrzymujemy

$$\psi(\vec{r}, t) = B_0(t)\left(\frac{1}{r} - \frac{1}{a}\right) + \mathcal{O}(r). \tag{1.34}$$

Rozwiążmy jeszcze równanie Schrödingera w przypadku fal $\boldsymbol{s}$ z pseudopotencjałem (1.14). Weźmy przy tym funkcję falową $\psi(\vec{r}) = \frac{u(r)}{r}$, gdzie $u(0)$ w ogólności może być różne od 0. Przepiszmy teraz laplasjan z $\psi(\vec{r})$ jako [11]

$$\nabla^2_{\vec{r}}\left(\frac{u(r)}{r}\right) = \nabla^2_{\vec{r}}\left(\frac{u(0)}{r} + \frac{u(r)-u(0)}{r}\right) = -4\pi u(0)\delta(\vec{r}) + \frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}^2u(r)}{\mathrm{d}r^2}, \tag{1.35}$$

gdzie skorzystaliśmy z równości $\nabla^2_{\vec{r}}\left(\frac{1}{r}\right) = -4\pi\delta(\vec{r})$. Równanie Schrödingera na $u(r)$ przyjmuje zatem postać

$$-\frac{\hbar^2}{mr}\frac{\mathrm{d}^2u(r)}{\mathrm{d}r^2} + \frac{4\pi\hbar^2}{m}u(0)\delta(\vec{r}) + \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}\delta(\vec{r})\frac{\mathrm{d}u(r)}{\mathrm{d}r} = \frac{E}{r}u(r). \tag{1.36}$$

Dostajemy stąd dwa równania

$$\frac{\hbar^2}{m}\frac{\mathrm{d}^2u(r)}{\mathrm{d}r^2} + Eu(r) = 0, \quad u(0) + a\frac{\mathrm{d}u(0)}{\mathrm{d}r} = 0. \tag{1.37}$$

Rozwiązując je otrzymujemy

$$u(r) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\sqrt{Em}}{\hbar}r}, \quad E = -\frac{\hbar^2}{ma^2}. \tag{1.38}$$

W przypadku gdy $a > 0$ (potencjał odpychający) rozwiązaniem jest stan związany (o energii $E_{zw} = -\hbar^2/ma^2$), którego funkcja falowa, po unormowaniu, przyjmuje postać

$$\psi_{zw}(\vec{r}) = \frac{\mathrm{e}^{-r/a}}{\sqrt{2\pi a}r} = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}}\left(\frac{1}{r} - \frac{1}{a}\right) + \mathcal{O}(r)\,, \tag{1.39}$$

gdzie rozwinięto eksponente do pierwszego rzędu. Jak widzimy, w oddziaływaniu kontaktowym funkcja falowa stanu związanego (1.39) przyjmuje dokładnie tą samą postać funkcyjną co funkcja falowa stanu rozproszeniowego (1.34).

1.5 Formalizm drugiej kwantyzacji dla fermionów

Przestrzeń Hilberta dla pojedynczego fermionu rozpinają stany $\phi_i(\vec{r})$ - np. stany własne energii (i oznacza zespół liczb kwantowych włącznie ze spinem). Gdy mamy do czynienia z układem N fermionów można wprowadzić, prostą w zastosowaniu, bazę w przestrzeni Hilberta, określającą liczbę fermionów w danym stanie jednocząstkowym $\phi_i(\vec{r})$ tzn.

$$|n_1, n_2, n_3, \ldots\rangle\,. \tag{1.40}$$

Są to tzw. stany Focka. Załóżmy, że $\phi_i(\vec{r})$ są kolejnymi stanami własnymi energii pojedynczej cząstki. W przypadku braku oddziaływań pomiędzy fermionami, stany (1.40) są stanami własnymi układu N fermionów. Stany takie łatwo wygenerować używając operatorów kreacji i anihilacji fermionów $\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_i$. Spełniają one następujące związki

$$\{\hat{a}_i, \hat{a}_j\} = \hat{a}_i\hat{a}_j + \hat{a}_j\hat{a}_i = 0, \quad \{\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger\} = \delta_{ij}. \tag{1.41}$$

Antysymetria ze względu na zamianę cząstek, wymagana dla fermionów, wynika wprost z równości $\{\hat{a}_i, \hat{a}_j\} = \{\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger\} = 0 \Longrightarrow \hat{a}_i^\dagger\hat{a}_j^\dagger = -\hat{a}_j^\dagger\hat{a}_i^\dagger$ (kolejność kreowania fermionów ma znaczenie!). Zauważamy ponadto, że z przypadku $i = j$ wynika, że nie da się umieścić dwóch fermionów w tym samym stanie jednocząstkowym. Działanie operatorów $\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger$ na stany (1.40) jest następujące

$$\hat{a}_i\,|n_1, \ldots, n_i, \ldots\rangle = \vartheta_i n_i\,|n_1, \ldots, 0_i, \ldots\rangle\,, \tag{1.42}$$

$$\hat{a}_i^\dagger\,|n_1, \ldots, n_i, \ldots\rangle = \vartheta_i(1 - n_i)\,|n_1, \ldots, 1_i, \ldots\rangle\,, \tag{1.43}$$

gdzie

$$\vartheta_i = (-1)^{\nu_i}, \quad \nu_i = \sum_{j=1}^{i-1} n_j. \tag{1.44}$$

W związku z antysymetrią ze względu na zamianę cząstek należy wprowadzić jakieś (dowolne) uporządkowanie. Przyjmiemy, że odpowiada ono ułożeniu kolejno stanów jednocząstkowych z rosnącą energią pojedynczej cząstki. W przypadku stanu podstawowego - obsadzone są wszystkie stany jednocząstkowe, aż do energii Fermiego - mamy

$$|1_1, 1_2, \ldots, 1_N, 0_{N+1}, \ldots\rangle = \hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2^\dagger \ldots \hat{a}_N^\dagger\,|0\rangle\,, \tag{1.45}$$

gdzie $|0\rangle$ jest stanem próżni. Działając na (1.45) operatorem $\hat{a}_{N+k}^\dagger,\ k > 0$ dostajemy

$$\hat{a}_{N+k}^\dagger\,|1_1, 1_2, \ldots, 1_N, 0_{N+1}, \ldots\rangle = (-1)^N\,|1_1, 1_2, \ldots, 1_N, 0_{N+1}, \ldots, 0_{N+k-1}, 1_{N+k}, 0_{N+k+1}, \ldots\rangle\,.$$

Wprowadzamy teraz operatory pola fermionowego

$$\hat{\psi}_\sigma(\vec{r}) = \sum_{k=1}^{\infty} \phi_k(\vec{r})\hat{a}_{k,\sigma}, \tag{1.46}$$

gdzie wskaźnik i podzielono na przestrzenne k i spinowe σ stopnie swobody. Operator pola fermionowego $\hat{\psi}_\sigma(\vec{r})$ anihiluje fermion o spinie σ w punkcie $\vec{r}$. Podobnie operator $\hat{\psi}^\dagger_\sigma(\vec{r})$ kreuje w punkcie $\vec{r}$ fermion o spinie σ. Z równości (1.41) otrzymujemy

$$\left\{\hat{\psi}_\sigma(\vec{r}), \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}\,')\right\} = 0, \quad \left\{\hat{\psi}_\sigma(\vec{r}), \hat{\psi}^\dagger_{\sigma'}(\vec{r}\,')\right\} = \delta(\vec{r} - \vec{r}\,')\delta_{\sigma\sigma'}. \tag{1.47}$$

Zapiszmy hamiltonian dla układu N cząstek o masie m spułapkowanych w potencjale $\mathcal{U}(\vec{r}_i)$ o wzajemnym oddziaływaniu opisywanym potencjałem $V(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$ (poniższe rozważania są słuszne zarówno dla fermionów jak i bozonów)

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N}\left[\frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} + \mathcal{U}(\vec{r}_i)\right] + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j=1}^{N} V(\vec{r}_i - \vec{r}_j). \tag{1.48}$$

Wiedząc, że $\hat{n}_i = \hat{a}^\dagger_i\hat{a}_i$ jest operatorem liczby cząstek na i-tym poziomie energetycznym pojedynczej cząstki, hamiltonian (1.48) możemy zapisać w innej postaci - przy wykorzystaniu operatorów $\hat{a}_i, \hat{a}^\dagger_i$

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{\infty} E_i\hat{a}^\dagger_i\hat{a}_i + \frac{1}{2}\sum_{i,j,i',j'} V_{i,j;i',j'}\hat{a}^\dagger_i\hat{a}^\dagger_j\hat{a}_{i'}\hat{a}_{j'}, \tag{1.49}$$

gdzie E_i i $\phi_i(\vec{r})$ to odpowiednio energia oraz stan własny pojedynczej cząstki w pułapce, a $V_{i,j;i',j'}$ wynosi

$$V_{i,j;i',j'} = \langle\phi_i, \phi_j|\, V\, |\phi_{i'}, \phi_{j'}\rangle = \int \mathrm{d}^3r\mathrm{d}^3r'\phi^*_i(\vec{r})\phi^*_j(\vec{r}\,')V(\vec{r} - \vec{r}\,')\phi_{i'}(\vec{r})\phi_{j'}(\vec{r}\,'). \tag{1.50}$$

Element macierzowy $V_{i,j;i',j'}$ można traktować, jako amplitudę rozproszczenia dwóch cząstek ze stanów $\phi_{i'}, \phi_{j'}$ do stanów ϕ_i, ϕ_j.

Pierwsza suma w wyrażeniu (1.49) jest oczywista. O poprawności drugiego członu można się przekonać analizując przykład dla $N = 2$. Najkrótszy rachunek można przeprowadzić dla bozonów, dlatego też w tym przypadku wyjątkowo posłużymy się układem bozonowym. Weźmy najprostszy stan bazowy w reprezentacji położeń, dla układu dwóch bozonów

$$\psi_{\{2,0,\ldots\}} = \langle\vec{r}_1, \vec{r}_2|2, 0, \ldots\rangle = \phi_1(\vec{r}_1)\phi_1(\vec{r}_2). \tag{1.51}$$

Od razu widać różnicę pomiędzy bozonami a fermionami - dwa bozony, w przeciwieństwie do fermionów, mogą znajdować się w jednym stanie. Element macierzowy V pomiędzy stanami $|2, 0, \ldots\rangle$ wynosi

$$\langle 2, 0, \ldots|\, V\, |2, 0, \ldots\rangle = \int \mathrm{d}^3r_1\mathrm{d}^3r_2\psi^*_{\{2,0,\ldots\}}V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\psi_{\{2,0,\ldots\}} =$$

$$= \int \mathrm{d}^3r_1\mathrm{d}^3r_2\phi^*_1(\vec{r}_1)\phi^*_1(\vec{r}_2)V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\phi_1(\vec{r}_1)\phi_1(\vec{r}_2) = V_{1,1;1,1}.$$

Zachodzi ponadto

$$\frac{1}{2}\sum_{i,j,i',j'} V_{i,j;i',j'}\,\langle 2, 0, \ldots|\, \hat{b}^\dagger_i\hat{b}^\dagger_j\hat{b}_{i'}\hat{b}_{j'}\, |2, 0, \ldots\rangle = \frac{1}{2}V_{1,1;1,1}\,\langle 2, 0, \ldots|\, \hat{b}^\dagger_1\hat{b}^\dagger_1\hat{b}_1\hat{b}_1\, |2, 0, \ldots\rangle = V_{1,1;1,1},$$

gdzie skorzystaliśmy z działania bozonowych operatorów kreacji i anihilacji na stany Focka

$$\hat{b}_i\,|\ldots, n_i, \ldots\rangle = \sqrt{n_i}\,|\ldots, n_i - 1, \ldots\rangle\,, \tag{1.52}$$

$$\hat{b}^\dagger_i\,|\ldots, n_i, \ldots\rangle = \sqrt{n_i + 1}\,|\ldots, n_i + 1, \ldots\rangle\,, \tag{1.53}$$

W ten sposób można sprawdzić również inne elementy macierzowe.

Wracamy do fermionów. Korzystając z operatorów pola fermionowego (1.46) możemy przepisać hamiltonian (1.49) w zwartej postaci

$$\hat{H} = \sum_{\sigma} \int \mathrm{d}^3 r \hat{\psi}^\dagger_\sigma(\vec{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \mathcal{U}_\sigma(\vec{r}) \right] \hat{\psi}_\sigma(\vec{r})$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{\sigma,\sigma'} \int \mathrm{d}^3 r \mathrm{d}^3 r' \hat{\psi}^\dagger_\sigma(\vec{r})\hat{\psi}^\dagger_{\sigma'}(\vec{r}\,')V(\vec{r}-\vec{r}\,')\hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}\,')\hat{\psi}_\sigma(\vec{r}). \tag{1.54}$$

Zwróćmy uwagę na to, że wymaganie hermitowskości $\hat{H}$ nie pozwala nam zmienić położenia żadnego operatora bez zmiany znaku przy nim stojącego, dlatego, że na przykład $\hat{\psi}^\dagger_\sigma(\vec{r})\hat{\psi}^\dagger_{\sigma'}(\vec{r}\,') = -\hat{\psi}^\dagger_{\sigma'}(\vec{r}\,')\hat{\psi}^\dagger_\sigma(\vec{r})$. Ewolucja czasowa operatorów $\hat{\psi}_\sigma(\vec{r})$ jest opisywana przez równanie Heisenberga

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial \hat{\psi}_\sigma(\vec{r})}{\partial t} = \left[\hat{\psi}_\sigma(\vec{r}), \hat{H} \right]. \tag{1.55}$$

Zajmijmy się jeszcze przez chwilę operatorami pola fermionowego (1.46). Pokażemy najpierw skąd wynika druga z równości (1.47)

$$\left\{ \hat{\psi}_\sigma(\vec{r}), \hat{\psi}^\dagger_{\sigma'}(\vec{r}\,') \right\} = \sum_{k,k'} \phi_k(\vec{r})\phi^*_{k'}(\vec{r}\,')\{\hat{a}_{k,\sigma}, \hat{a}^\dagger_{k',\sigma'}\} \stackrel{(1.41)}{=} \sum_{k,k'} \phi_k(\vec{r})\phi^*_{k'}(\vec{r}\,')\delta_{kk'}\delta_{\sigma\sigma'} =$$
$$= \sum_k \phi_k(\vec{r})\phi^*_k(\vec{r}\,')\delta_{\sigma\sigma'} = \sum_k \langle \vec{r}|\phi_k\rangle \langle \phi_k|\vec{r}\,'\rangle \delta_{\sigma\sigma'} = \sum_k |\phi_k\rangle \langle\phi_k| \langle \vec{r}|\vec{r}\,'\rangle \delta_{\sigma\sigma'} = \delta(\vec{r}-\vec{r}\,')\delta_{\sigma\sigma'}.$$

Pierwsza z równości (1.47) jest wynikiem znikania antykomutatora $\{\hat{a}_{k,\sigma}, \hat{a}_{k',\sigma'}\} = 0$. Skonstruujmy jeszcze stan składający się z $N = n+m$ fermionów w położeniach $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_n, \vec{s}_1, \vec{s}_2, \ldots, \vec{s}_m$, z których n ma spin σ, a m spin σ'

$$|\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_n, \vec{s}_1, \ldots, \vec{s}_m\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!m!}} \sum_{k_1,\ldots,k_n,q_1,\ldots,q_m} \langle \phi_{k_1}, \ldots, \phi_{k_n}, \phi_{q_1}, \ldots, \phi_{q_m}|\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_n, \vec{s}_1, \ldots, \vec{s}_m\rangle$$
$$\times |\phi_{k_1}, \ldots, \phi_{k_n}, \phi_{q_1}, \ldots, \phi_{q_m}\rangle =$$
$$= \frac{1}{\sqrt{n!m!}} \sum_{k_1,\ldots,k_n,q_1,\ldots,q_m} \phi^*_{k_1}(\vec{r}_1)\ldots\phi^*_{k_n}(\vec{r}_n)\phi^*_{q_1}(\vec{s}_1)\ldots\phi^*_{q_m}(\vec{s}_m)\,|\phi_{k_1}, \ldots, \phi_{k_n}, \phi_{q_1}, \ldots, \phi_{q_m}\rangle =$$
$$= \frac{1}{\sqrt{n!m!}} \sum_{k_1,\ldots,k_n,q_1,\ldots,q_m} \phi^*_{k_1}(\vec{r}_1)\ldots\phi^*_{k_n}(\vec{r}_n)\phi^*_{q_1}(\vec{s}_1)\ldots\phi^*_{q_m}(\vec{s}_m)\hat{a}^\dagger_{k_1,\sigma}\ldots\hat{a}^\dagger_{k_n,\sigma}\hat{a}^\dagger_{q_1,\sigma'}\ldots\hat{a}^\dagger_{q_m,\sigma'}|0\rangle.$$

Wykorzystując operatory pola fermionowego otrzymujemy

$$|\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_n, \vec{s}_1, \ldots, \vec{s}_m\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!m!}}\hat{\psi}^\dagger_\sigma(\vec{r}_1)\ldots\hat{\psi}^\dagger_\sigma(\vec{r}_n)\hat{\psi}^\dagger_{\sigma'}(\vec{s}_1)\ldots\hat{\psi}^\dagger_{\sigma'}(\vec{s}_m)\,|0\rangle. \tag{1.56}$$

Czynnik normalizacyjny wyznaczono korzystając z warunku

$$\langle \vec{r}\,'_1, \ldots, \vec{r}\,'_n, \vec{s}\,'_1, \ldots, \vec{s}\,'_m|\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_n, \vec{s}_1, \ldots, \vec{s}_m\rangle = \delta(\vec{r}\,'_1 - \vec{r}_1)\ldots\delta(\vec{s}\,'_m - \vec{s}_m).$$

Otrzymujemy kolejno

$$\sum_{k_1,\ldots,k_n,q_1,\ldots,q_m}\sum_{t_1,\ldots,t_n,f_1,\ldots,f_m} \langle \phi_{k_1,\ldots,k_n}, \phi_{q_1,\ldots,q_m}|\vec{r}_{1,\ldots,n}, \vec{s}_{1,\ldots,m}\rangle \langle \vec{r}\,'_{1,\ldots,n}, \vec{s}\,'_{1,\ldots,m}|\phi_{t_1,\ldots,t_n}, \phi_{f_1,\ldots,f_m}\rangle$$
$$\times \langle \phi_{t_1,\ldots,t_n}, \phi_{f_1,\ldots,f_m}|\phi_{k_1,\ldots,k_n}, \phi_{q_1,\ldots,q_m}\rangle =$$
$$= n!m! \sum_{k_1,\ldots,k_n,q_1,\ldots,q_m} \langle \phi_{k_1,\ldots,k_n}, \phi_{q_1,\ldots,q_m}|\vec{r}_{1,\ldots,n}, \vec{s}_{1,\ldots,m}\rangle \langle \vec{r}\,'_{1,\ldots,n}, \vec{s}\,'_{1,\ldots,m}|\phi_{k_1,\ldots,k_n}, \phi_{q_1,\ldots,q_m}\rangle =$$
$$= n!m! \sum_{k_1,\ldots,k_n,q_1,\ldots,q_m} \phi_{k_1}(\vec{r}\,'_1)\phi^*_{k_1}(\vec{r}_1)\ldots\phi_{k_n}(\vec{r}\,'_n)\phi^*_{k_n}(\vec{r}_n)\phi_{q_1}(\vec{s}\,'_1)\phi^*_{q_1}(\vec{s}_1)\ldots\phi_{q_m}(\vec{s}\,'_m)\phi^*_{q_m}(\vec{s}_m) =$$
$$= n!m!\sum_{k_1}\phi_{k_1}(\vec{r}\,'_1)\phi^*_{k_1}(\vec{r}_1)\ldots\sum_{q_m}\phi_{q_m}(\vec{s}\,'_m)\phi^*_{q_m}(\vec{s}_m) = n!m!\sum_{k_1}|\phi_{k_1}\rangle\langle\phi_{k_1}|\langle\vec{r}\,'_1|\vec{r}_1\rangle\ldots$$
$$\times \sum_{q_m}|\phi_{q_m}\rangle\langle\phi_{q_m}|\langle\vec{s}\,'_m|\vec{s}_m\rangle = n!m!\delta(\vec{r}\,'_1-\vec{r}_1)\ldots\delta(\vec{s}\,'_m-\vec{s}_m).$$

Rozdział 2

Dystrybucja $\Lambda(\vec{k})$ i jej transformata Fouriera $\lambda(\vec{r})$

2.1 Dystrybucja $\Lambda(\vec{k})$

Rozpatrzmy dwa identyczne fermiony w próżni (o różnych rzutach spinu). Problem ten sprowadza się do rozwiązania następującego równania Schrödingera

$$\left(-\frac{\hbar^2}{m}\nabla^2_{\vec{r}} + V(\vec{r})\right)\psi(\vec{r}) = E_r\psi(\vec{r}), \tag{2.1}$$

gdzie E_r jest energią ruchu względnego. Zakładając, że zasięg potencjału r_0 jest dużo mniejszy niż pojawiające się w problemie wielkości o wymiarze długości (również amplituda rozpraszania a), możemy V zastąpić pseudopotencjałem postaci (1.14)

$$V(\vec{r}) = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}\delta(\vec{r})\frac{\partial}{\partial r}r, \tag{2.2}$$

gdzie r jest odległością między dwiema oddziałującymi cząstkami. Oczywiście potencjał ten jest sferycznie symetryczny. W granicy $r_0 \to 0$ przy zachowaniu a pseudopotencjał (2.2) jest dokładny. Korzystając z transformaty Fouriera

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int \mathrm{d}^3k\widetilde{\psi}(\vec{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}, \tag{2.3}$$

oraz równania (2.1), z zastąpionym V przez pseudopotencjał (2.2), otrzymujemy

$$\int \mathrm{d}^3k\left(E_r - \frac{\hbar^2k^2}{m}\right)\widetilde{\psi}(\vec{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}} = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}\int \mathrm{d}^3k\widetilde{\psi}(\vec{k})\delta(\vec{r})\frac{\partial}{\partial r}\left(r\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}\right). \tag{2.4}$$

Zdefiniujmy teraz

$$\delta(\vec{r})\frac{\partial}{\partial r}\left(r\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}\right) \equiv \delta(\vec{r})\Lambda(\vec{k}), \tag{2.5}$$

gdzie $\Lambda(\vec{k})$ jest pewną nieznaną dystrybucją $\vec{k}$. Scałkujmy równanie (2.5) po przestrzeni $\vec{r}$

$$\int \mathrm{d}^3r\delta(\vec{r})\frac{\partial}{\partial r}\left(r\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}\right) = \int \mathrm{d}^3r\delta(\vec{r})\Lambda(\vec{k}) = \Lambda(\vec{k})\int \mathrm{d}^3r\delta(\vec{r}) = \Lambda(\vec{k}),$$

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(r\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}\right) = \frac{\partial}{\partial r}\left(r\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr\cos\theta}\right) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kr\cos\theta}(1+\mathrm{i}kr\cos\theta) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}(1+\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}).$$

Skąd całka z lewej strony

$$\int \mathrm{d}^3 r \delta(\vec{r}) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}(1+\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}) = 1, \quad k<\infty.$$

Otrzymujemy zatem

$$\Lambda(\vec{k}) = 1, \quad k < \infty. \tag{2.6}$$

Zauważmy ponadto, że $\Lambda(\vec{k})$ jest bezwymiarowa co widać wprost z równości definiującej (2.5).

Pomnóżmy teraz obustronnie równanie (2.5) przez $1/k^2$ i scałkujmy po przestrzeni $\vec{k}$

$$\int \frac{\mathrm{d}^3 k}{k^2} \delta(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial r}\left(r\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}\right) = \int \mathrm{d}^3 k \delta(\vec{r}) \frac{\Lambda(\vec{k})}{k^2}.$$

Rozpisujemy lewą stronę

$$\int \frac{\mathrm{d}^3 k}{k^2} \delta(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial r}\left(r\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}\right) = \delta(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial r} r \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{k^2} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}} = \delta(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial r} r \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \int_{-1}^{1} \mathrm{d}(\cos\theta) \int_0^{\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}} \mathrm{d}k.$$

Wykonując najpierw całki po kątach otrzymujemy

$$\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \int_{-1}^{1} \mathrm{d}(\cos\theta) \int_0^{\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kr\cos\theta} \mathrm{d}k = 4\pi \int_0^{\infty} \frac{\sin(kr)}{kr} \mathrm{d}k.$$

Ostatnią całkę liczymy w następujący sposób

$$\int_0^{\infty} \frac{\sin(kr)}{kr} \mathrm{d}k = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin(kr)}{kr} \mathrm{d}k = \frac{\mathrm{sgn}(r)}{2r} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin x}{x} \mathrm{d}x,$$

gdzie $\mathrm{sgn}(r)$ pojawia się ze względu na ewentualną zmianę granic całkowania (odwrócenie granic dla $r<0$). Zauważamy, że

$$\frac{\sin x}{x} = \Im\left(\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}z}}{z}\right) = \lim_{\varepsilon\to 0} \Im\left(\frac{z\mathrm{e}^{\mathrm{i}z}}{z^2+\varepsilon^2}\right).$$

Mamy 2 bieguny (w $\pm\mathrm{i}\varepsilon$) przy czym kontur całkowania obejmuje jedynie biegun w $+\mathrm{i}\varepsilon$. Wykorzystując twierdzenie o residuach otrzymujemy wynik całki

$$\int_0^{\infty} \frac{\sin(kr)}{kr} = \frac{\pi \mathrm{sgn}(r)}{2r}.$$

W naszym problemie $r = |\vec{r}| \Longrightarrow \mathrm{sgn}(r) = 1$ skąd ostatecznie otrzymujemy

$$\int \frac{\mathrm{d}^3 k}{k^2} \delta(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial r}\left(r\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}\right) = 2\pi^2 \delta(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{r}{r}\right) = 0.$$

Prowadzi to nas do związku

$$\int \mathrm{d}^3 k \frac{\Lambda(\vec{k})}{k^2} = 0. \tag{2.7}$$

Łącząc równania (2.6) i (2.7) wydaje się, że otrzymujemy sprzeczność. Uwidacznia się ona jeśli założymy, że całka z $\Lambda(\vec{k})/k^2$ po całej przestrzeni $\vec{k}$ jest granicą

$$\lim_{V\to\mathbb{R}^3} \int_V \mathrm{d}^3 k \frac{\Lambda(\vec{k})}{k^2} = \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}^3 k \frac{\Lambda(\vec{k})}{k^2}.$$

By jednocześnie spełnione były równania (2.6) oraz (2.7) musimy zrezygnować z powyższego założenia, które de facto, jest dla znanych funkcji standardową matematyczną definicją całki po całej przestrzeni. Zauważmy, że $\Lambda(\vec{k})$ oraz $\Lambda(\vec{k})/k^2$ nie muszą spełniać tych samych reguł.

Dla późniejszej wygody zapostulujemy ponadto, że

$$\Lambda(\vec{k}) = \Lambda(-\vec{k}), \tag{2.8}$$

co nie jest sprzeczne z równaniami (2.6) i (2.7). Zwracamy przy okazji uwagę na to, że $\Lambda^*(\vec{k})$ oraz $\Lambda(\xi\vec{k})$ (dla $\xi \neq 0,\ \xi \in \mathbb{R}$) spełniają dokładnie te same równania (2.6) - (2.8) co $\Lambda(\vec{k})$ skąd wyciągamy następujące wnioski

$$\Lambda^*(\vec{k}) = \Lambda(\vec{k}), \tag{2.9}$$

$$\Lambda(\xi\vec{k}) = \Lambda(\vec{k}). \tag{2.10}$$

Zbadajmy teraz całkę $\int d^3k \frac{\Lambda(\vec{k})}{(\vec{k}-\vec{k}_0)^2+\alpha^2}$ dla stałego, skończonego wektora $\vec{k}_0$ oraz $\alpha \in \mathbb{R}$. Korzystając z równań (2.7) i (2.8) możemy zapisać kolejno

$$\int d^3k \frac{\Lambda(\vec{k})}{(\vec{k}-\vec{k}_0)^2+\alpha^2} = \int d^3k \Lambda(\vec{k}) \left[\frac{1}{(\vec{k}-\vec{k}_0)^2+\alpha^2} + \frac{\beta}{k^2}\right] =$$

$$= \int d^3k \Lambda(\vec{k}) \left[\frac{1}{2(\vec{k}-\vec{k}_0)^2+2\alpha^2} + \frac{1}{2(-\vec{k}-\vec{k}_0)^2+2\alpha^2} + \frac{\beta}{k^2}\right] =$$

$$= \int d^3k \Lambda(\vec{k}) \frac{2k^2\left[(\vec{k}-\vec{k}_0)^2+(\vec{k}+\vec{k}_0)^2+2\alpha^2\right] + \beta\left[2(\vec{k}-\vec{k}_0)^2+2\alpha^2\right]\left[2(\vec{k}+\vec{k}_0)^2+2\alpha^2\right]}{k^2\left[2(\vec{k}-\vec{k}_0)^2+2\alpha^2\right]\left[2(\vec{k}+\vec{k}_0)^2+2\alpha^2\right]}.$$

Biorąc stałą $\beta = -1$ dostajemy

$$\int d^3k \Lambda(\vec{k}) \frac{16(\vec{k}\cdot\vec{k}_0)^2 - 4(k_0^2+\alpha^2)(k^2+k_0^2+\alpha^2)}{k^2\left[2(\vec{k}-\vec{k}_0)^2+2\alpha^2\right]\left[2(\vec{k}+\vec{k}_0)^2+2\alpha^2\right]}.$$

Ułamek w całce dla dużych k zanika jak $1/k^4$ zatem całkowanie można ograniczyć do skończonej przestrzeni $\vec{k}$. W takim przypadku zgodnie z równaniem (2.6) $\Lambda(\vec{k}) = 1$. Nasz problem sprowadza się więc do znalezienia wartości wyrażenia (wykorzystujemy fakt, że całki z naszego wyrażenia podcałkowego po sferach o nieskończonym promieniu dają 0)

$$\lim_{q\to\infty} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^{1} d(\cos\theta) \int_0^q dk \left[\frac{k^2}{2(\vec{k}-\vec{k}_0)^2+2\alpha^2} + \frac{k^2}{2(\vec{k}+\vec{k}_0)^2+2\alpha^2} - 1\right],$$

gdzie układ współrzędnych najlepiej dobrać tak by $\vec{k}_0 \cdot \hat{z} = |\vec{k}_0|$ czyli tak by kąt θ był kątem pomiędzy wektorami $\vec{k}$ i $\vec{k}_0$. Po długim rachunku otrzymujemy wynik

$$\int d^3k \frac{\Lambda(\vec{k})}{(\vec{k}-\vec{k}_0)^2+\alpha^2} = -2\pi^2|\alpha|. \tag{2.11}$$

Z równania (2.11) wyciągamy interesujący wniosek. Mianowicie, całkując po całej przestrzeni dystrybucję $\Lambda(\vec{k})/[(\vec{k}-\vec{k}_0)^2+\alpha^2]$, która dla skończonych $\vec{k}$ jest dodatnia, otrzymujemy wynik ujemny!

Korzystając z równania (2.11) z $\alpha = 0$ i porównując z (2.7) oraz (2.10) dostajemy

$$\Lambda(\xi\vec{k}-\vec{k}_0) = \Lambda(\vec{k}), \tag{2.12}$$

dla $\xi \neq 0,\ \xi \in \mathbb{R}$ oraz stałego skończonego $\vec{k}_0$.

Rozpatrzmy teraz całkę z wyrażenia (2.7) jako sumę całek po kuli o promieniu $\mathcal{K} \geqslant 0$ oraz dopełnieniu przestrzeni $\vec{k}$

$$\int \mathrm{d}^3k \frac{\Lambda(\vec{k})}{k^2} = \int\limits_{k<\mathcal{K}} \mathrm{d}^3k \frac{\Lambda(\vec{k})}{k^2} + \int\limits_{k>\mathcal{K}} \mathrm{d}^3k \frac{\Lambda(\vec{k})}{k^2}.$$

Całka po kuli jest oczywiście równa $4\pi\mathcal{K}$ zaś całkę po dopełnieniu możemy zapisać jako całkę po całej przestrzeni z użyciem dystrybucji $\Theta(k - \mathcal{K})$. Wykorzystując ponadto równość (2.7) otrzymujemy

$$\int\limits_{k>\mathcal{K}} \mathrm{d}^3k \frac{\Lambda(\vec{k})}{k^2} = \int \mathrm{d}^3k \Theta(k - \mathcal{K}) \frac{\Lambda(\vec{k})}{k^2} = \int \mathrm{d}^3k \frac{\Lambda(\vec{k})}{k^2} \left(\Theta(k - \mathcal{K}) + \beta\right).$$

Biorąc $\beta = -1$ i zauważając, że $\Theta(k - \mathcal{K}) - 1 = -\Theta(\mathcal{K} - k)$ otrzymujemy

$$\int\limits_{k>\mathcal{K}} \mathrm{d}^3k \frac{\Lambda(\vec{k})}{k^2} = -\int \mathrm{d}^3k \Theta(\mathcal{K} - k) \frac{\Lambda(\vec{k})}{k^2} = -\int\limits_{k<\mathcal{K}} \mathrm{d}^3k \frac{\Lambda(\vec{k})}{k^2} = -4\pi\mathcal{K}.$$

Skąd ostatecznie

$$\int \mathrm{d}^3k \frac{\Lambda(\vec{k})}{k^2} = \int\limits_{k<\mathcal{K}} \mathrm{d}^3k \frac{\Lambda(\vec{k})}{k^2} + \int\limits_{k>\mathcal{K}} \mathrm{d}^3k \frac{\Lambda(\vec{k})}{k^2} = 4\pi\mathcal{K} - 4\pi\mathcal{K} = 0,$$

co jest wynikiem zgodnym z całką po całej przestrzeni (2.7). Rachunek ten można powtórzyć biorąc dowolne dwie (lub więcej), dopełniające się wzajemnie do całej przestrzeni podprzestrzenie, jeśli tylko nieskończony wektor $\vec{k}$ zawarty jest w tylko jednej z podprzestrzeni (pokazać to można definiując dystrybucję działającą dla tych podprzestrzeni dokładnie tak samo jak Θ Heaviside'a w przypadku, wybranych przez nas dla prostoty, kuli i jej dopełnienia). W ogólności, całki po całej przestrzeni $\vec{k}$ zawierające dystrybucję $\Lambda(\vec{k})$ są równe sumie całek po podprzestrzeniach, które dopełniają się do całej przestrzeni $\vec{k}$, przy czym znów tylko jedna z nich może zawierać nieskończony $\vec{k}$.

Zbierzmy równania określające dystrybucję $\Lambda(\vec{k})$ oraz ważniejsze wyniki, które za ich pomocą otrzymaliśmy:

i) $\delta(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}} \right) \equiv \delta(\vec{r}) \Lambda(\vec{k}),$

ii) $\Lambda(\vec{k}) = 1, \quad k < \infty,$

iii) $\int \mathrm{d}^3k \frac{\Lambda(\vec{k})}{k^2} = 0,$

iv) $\Lambda(\vec{k}) = \Lambda(-\vec{k}),$

v) $\Lambda^*(\vec{k}) = \Lambda(\vec{k}),$

vi) $\Lambda(\xi\vec{k} - \vec{k}_0) = \Lambda(\vec{k}), \quad \xi \neq 0, \quad \xi \in \mathbb{R}, \quad |\vec{k}_0| < \infty,$

vii) $\int \mathrm{d}^3k \frac{\Lambda(\vec{k})}{(\vec{k} - \vec{k}_0)^2 + \alpha^2} = -2\pi^2|\alpha|, \quad \alpha \in \mathbb{R}, \quad |\vec{k}_0| < \infty.$

2.2 Transformata Fouriera dystrybucji $\Lambda(\vec{k})$

Weźmy transformatę Fouriera dystrybucji $\Lambda(\vec{k})$

$$\lambda(\vec{r}) \equiv \int \frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\Lambda(\vec{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}. \tag{2.13}$$

Zauważamy, że jeśli $\vec{k}$ jest wektorem falowym to wymiarem $\lambda(\vec{r})$ jest $[\text{długość}]^{-3}$. Wiedząc, że $\Lambda(\xi\vec{k}) = \Lambda(\vec{k})$ dla $\xi \neq 0,\quad \xi \in \mathbb{R}$, co jest równością **vi**) z $\vec{k}_0 = 0$, dostajemy

$$\lambda(\xi\vec{r}) = \int \frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\Lambda(\vec{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\xi\vec{k}\cdot\vec{r}} = \int \frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\Lambda(\xi\vec{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\xi\vec{k}\cdot\vec{r}} \underbrace{=}_{\vec{k}\to\frac{1}{\xi}\vec{k}'} |\xi|^{-3}\int \frac{\mathrm{d}^3k'}{(2\pi)^3}\Lambda(\vec{k}')\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}'\cdot\vec{r}},$$

gdzie moduł pojawia się w wyniku znoszenia się znaku ξ z ewentualnym odwróceniem granic (dla $\xi < 0$). Mamy zatem następującą równość

$$\lambda(\xi\vec{r}) = |\xi|^{-3}\lambda(\vec{r}), \tag{2.14}$$

dla $\xi \neq 0,\quad \xi \in \mathbb{R}$. W szczególności kładąc $\xi = -1$ otrzymujemy parzystość λ

$$\lambda(\vec{r}) = \lambda(-\vec{r}). \tag{2.15}$$

Korzystając teraz jeszcze z rzeczywistości $\Lambda(\vec{k})$ - własność **v**) - mamy

$$\lambda^*(\vec{r}) = \int \frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\Lambda^*(\vec{k})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}} = \int \frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\Lambda(\vec{k})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}} = \lambda(-\vec{r}),$$

co w połączeniu z (2.15) daje rzeczywistość λ

$$\lambda^*(\vec{r}) = \lambda(\vec{r}). \tag{2.16}$$

Weźmy własność **vii**) z $\alpha = 0$ i wstawmy doń odwrotną transformatę Fouriera

$$\Lambda(\vec{k}) = \int \mathrm{d}^3r\lambda(\vec{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}. \tag{2.17}$$

Mamy wtedy kolejno

$$\int \mathrm{d}^3k\frac{\Lambda(\vec{k})}{(\vec{k}-\vec{k}_0)^2} = \int \mathrm{d}^3k\int \mathrm{d}^3r\frac{\lambda(\vec{r})}{(\vec{k}-\vec{k}_0)^2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}} \underbrace{=}_{\vec{k}-\vec{k}_0\to\vec{k}'} \int \mathrm{d}^3r\lambda(\vec{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}_0\cdot\vec{r}}\int \mathrm{d}^3k'\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}'\cdot\vec{r}}}{k'^2} = 0.$$

Obliczmy całkę po przestrzeni $\vec{k}'$ (całkę taką liczyliśmy już wcześniej przy wyprowadzaniu własności **iii**))

$$\int \mathrm{d}^3k'\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}'\cdot\vec{r}}}{k'^2} = \int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\int_{-1}^{1}\mathrm{d}(\cos\theta)\int_0^{\infty}\mathrm{d}k'\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k'r\cos\theta} = 2\pi^2\frac{\mathrm{sgn}(r)}{r} \overset{r=|\vec{r}|}{=} \frac{2\pi^2}{r}.$$

Widzimy stąd, że własność **vii**) (dla $\alpha = 0$) możemy przedstawić w przestrzeni $\vec{r}$ w następujący sposób

$$\int \mathrm{d}^3r\frac{\lambda(\vec{r})}{r}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}_0\cdot\vec{r}} = 0. \tag{2.18}$$

Rozwijając eksponentę dostajemy

$$\int \mathrm{d}^3 r \frac{\lambda(\vec{r})}{r} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}_0\cdot\vec{r}} = \sum_{q=0}^{\infty} \int \mathrm{d}^3 r \frac{\lambda(\vec{r})}{r} \frac{(-\mathrm{i}\vec{k}_0\cdot\vec{r})^q}{q!} =$$

$$= \int \mathrm{d}^3 r \frac{\lambda(\vec{r})}{r} - \mathrm{i}\int \mathrm{d}^3 r \lambda(\vec{r})\vec{k}_0\cdot\hat{r} - \frac{\mathrm{i}}{2}\int \mathrm{d}^3 r \lambda(\vec{r})(\vec{k}_0\cdot\hat{r})(\vec{k}_0\cdot\vec{r}) + \ldots = 0. \tag{2.19}$$

W związku z tym, że powyższa równość ma być spełniona dla każdego skończonego $\vec{k}_0$, wszystkie kolejne całki powinny się zerować. Mamy zatem na przykład

$$\int \mathrm{d}^3 r \frac{\lambda(\vec{r})}{r} = 0, \tag{2.20}$$

$$\int \mathrm{d}^3 r \lambda(\vec{r})\hat{r} = 0. \tag{2.21}$$

Rozważmy funkcję $\phi(\vec{r})$, o której założymy, że jest dobrze określona w $\vec{r}=0$. Zapisując tę funkcję w postaci całki z jej transformaty Fouriera

$$\phi(\vec{r}) = \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3}\widetilde{\phi}(\vec{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}} \Longrightarrow \phi(0) = \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3}\widetilde{\phi}(\vec{k}) = \int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi \int_{-1}^{1}\mathrm{d}(\cos\theta)\int_0^{\infty} k^2\widetilde{\phi}(\vec{k})\mathrm{d}k,$$

zauważamy, że dobra określoność funkcji $\phi(\vec{r})$ w zerze wymusza znikanie $\widetilde{\phi}(\vec{k})$ szybciej niż $1/k^3$. Całkę z iloczynu $\lambda(\vec{r})\phi(\vec{r})$ możemy napisać jako całkę z iloczynu ich transformat

$$\int \mathrm{d}^3 r\lambda(\vec{r})\phi(\vec{r}) = \int \frac{\mathrm{d}^3 k'\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3}\Lambda(\vec{k}')\widetilde{\phi}(\vec{k})\int\frac{\mathrm{d}^3 r}{(2\pi)^3}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\vec{k}+\vec{k}')\cdot\vec{r}} = \int \frac{\mathrm{d}^3 k'\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3}\Lambda(\vec{k}')\widetilde{\phi}(\vec{k})\delta(\vec{k}+\vec{k}') =$$

$$= \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3}\Lambda(-\vec{k})\widetilde{\phi}(\vec{k}) = \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3}\Lambda(\vec{k})\widetilde{\phi}(\vec{k}) = \lim_{\mathcal{K}\to\infty}\int_{k\leqslant\mathcal{K}}\frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3}\widetilde{\phi}(\vec{k}) = \phi(0),$$

gdzie skorzystaliśmy z parzystości $\Lambda(\vec{k})$ oraz z tego, że $\widetilde{\phi}(\vec{k})$ znika szybciej niż k^{-3} co pozwala na wykorzystanie, zastosowanego już wcześniej manewru z ograniczaniem całkowania do skończonej przestrzeni $\vec{k}$ gdzie zgodnie z własnością **ii)** $\Lambda(\vec{k}) = 1$. Te zabiegi doprowadzają nas do następującej równości

$$\int \mathrm{d}^3 r\lambda(\vec{r})\phi(\vec{r}) = \phi(0). \tag{2.22}$$

Równość (2.22) pociąga za sobą natychmiastowe konsekwencje

$$\lambda(\vec{r}) = 0, \quad \vec{r}\neq 0, \tag{2.23}$$

$$\int \mathrm{d}^3 r\lambda(\vec{r}) = 1. \tag{2.24}$$

Patrząc na rozwinięcie (2.19) zauważamy, że dla wszystkich funkcji $\chi(\vec{r})$, gładkich w obszarze zawierającym $\vec{r}=0$, zachodzi

$$\int \mathrm{d}^3\lambda(\vec{r})\frac{\chi(\vec{r})}{r} = 0. \tag{2.25}$$

Widać to gdy zastosujemy rozwinięcie funkcji $\chi(\vec{r})$ w szereg Taylora w $\vec{r}=0$ (dlatego funkcje te muszą być gładkie w tym obszarze). Możemy napisać np. $\chi(\vec{r}) = \alpha + \vec{\beta}\cdot\vec{r} + \mathcal{O}(r^2)$ i porównać z (2.20) oraz (2.21).

Równania (2.22) i (2.23) pokazują, że istnieje wyraźne podobieństwo pomiędzy funkcjami $\lambda(\vec{r})$ a $\delta(\vec{r})$. Znaleźliśmy również istotne różnice: $\int \mathrm{d}^3 r\frac{\lambda(\vec{r})}{r} = 0$ gdy $\int \mathrm{d}^3 r\frac{\delta(\vec{r})}{r}$ jest rozbieżna, a także $\int \mathrm{d}^3 r\lambda(\vec{r})\hat{r} = 0$ podczas gdy $\int \mathrm{d}^3 r\delta(\vec{r})\hat{r}$ jest niezdefiniowana.

Równości (2.22) oraz (o $\phi(\vec{r})$ zakładamy dodatkowo, że $\int \mathrm{d}^3 r\delta(\vec{r})\frac{\partial}{\partial r}(r\phi(\vec{r}))$ jest dobrze zdefiniowana)

$$\int \mathrm{d}^3 r \delta(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial r} \left(r\phi(\vec{r}) \right) = \int \mathrm{d}^3 r \delta(\vec{r}) r \frac{\partial \phi(\vec{r})}{\partial r} + \int \mathrm{d}^3 r \delta(\vec{r}) \phi(\vec{r}) = \phi(0),$$

implikują

$$\int \mathrm{d}^3 r \delta(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial r} \left(r\phi(\vec{r}) \right) = \int \mathrm{d}^3 \lambda(\vec{r}) \phi(\vec{r}). \tag{2.26}$$

Wycałkujmy i) obustronnie po przestrzeni $\vec{r}$

$$\int \mathrm{d}^3 r \delta(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}} \right) = \int \mathrm{d}^3 r \delta(\vec{r}) \Lambda(\vec{k}) = \Lambda(\vec{k}).$$

Biorąc $\phi(\vec{r}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}$ i korzystając z (2.26) otrzymujemy

$$\Lambda(\vec{k}) = \int \mathrm{d}^3 r \lambda(\vec{r}) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}, \tag{2.27}$$

co jest zgodne z (2.13) ponieważ $\Lambda(\vec{k}) = \Lambda(-\vec{k})$.

Zbierzmy, podobnie jak poprzednio, wszystkie własności $\lambda(\vec{r})$ (funkcje $\phi(\vec{r})$ i $\chi(\vec{r})$ określono w dyskusji powyżej):

viii) $\lambda(\xi\vec{r}) = |\xi|^{-3}\lambda(\vec{r}), \quad \xi \neq 0, \quad \xi \in \mathbb{R},$

ix) $\lambda(\vec{r}) = \lambda(-\vec{r}),$

x) $\lambda^*(\vec{r}) = \lambda(\vec{r}),$

xi) $\int \mathrm{d}^3 r \frac{\lambda(\vec{r})}{r} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}_0\cdot\vec{r}} = 0, \quad |\vec{k}_0| < \infty,$

xii) $\int \mathrm{d}^3 r \frac{\lambda(\vec{r})}{r} = 0, \quad \int \mathrm{d}^3 r \lambda(\vec{r}) \hat{r} = 0,$

xiii) $\int \mathrm{d}^3 r \lambda(\vec{r}) \phi(\vec{r}) = \phi(0),$

xiv) $\lambda(\vec{r}) = 0, \quad \vec{r} \neq 0,$

xv) $\int \mathrm{d}^3 r \lambda(\vec{r}) = 1,$

xvi) $\int \mathrm{d}^3 \lambda(\vec{r}) \frac{\chi(\vec{r})}{r} = 0.$

Rozdział 3

Selektory krótkiego zasięgu

3.1 Dystrybucja $L(\vec{k})$ i jej transformata Fouriera $l(\vec{r})$

Jeśli odrzucimy założenie, że całka po całej przestrzeni jest granicą

$$\lim_{V\to\mathbb{R}^3}\int_V \mathrm{d}^3k f(\vec{k}) = \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}^3k f(\vec{k}),$$

to, oprócz $\Lambda(\vec{k})$, może istnieć inna dystrybucja $L(\vec{k})$ o następujących własnościach

$$L(\vec{k}) = 0, \quad k < \infty, \tag{3.1}$$

$$\int \frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\frac{L(\vec{k})}{k^2} = 1, \tag{3.2}$$

$$L(\vec{k}) = L(-\vec{k}). \tag{3.3}$$

Równość (3.2) pociąga za sobą wymiar $L(\vec{k})$ (jeśli tylko $\vec{k}$ jest wielkością wymiarową). W przypadku gdy $\vec{k}$ jest wektorem falowym $L(\vec{k})$ ma wymiar długości (pamiętamy przy tym, że $\Lambda(\vec{k})$ jest bezwymiarowa).

Omówmy pokrótce inne własności $L(\vec{k})$. Zauważamy od razu, że dla dowolnej zwykłej funkcji $\tilde{f}(\vec{k})$, dla której poniższa granica jest dobrze określona, zachodzi

$$\int \frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}L(\vec{k})\tilde{f}(\vec{k}) = \int \frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\frac{L(\vec{k})}{k^2}k^2\tilde{f}(\vec{k}) = \lim_{\vec{k}\to\infty} k^2\tilde{f}(\vec{k})\int \frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\frac{L(\vec{k})}{k^2},$$

bo z (3.1) całka po całej przestrzeni sprowadza się do całki po sferze w nieskończoności. Wykorzystując jeszcze (3.2) otrzymujemy

$$\int \frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}L(\vec{k})\tilde{f}(\vec{k}) = \lim_{\vec{k}\to\infty} k^2\tilde{f}(\vec{k}). \tag{3.4}$$

Pozostaje jeszcze dookreślenie funkcji $\tilde{f}(\vec{k})$. By granica z równania (3.4) była dobrze określona $\tilde{f}(\vec{k})$ musi znikać conajmniej jak

$$\tilde{f}(\vec{k}) = \frac{\gamma}{k^2} + \mathcal{O}(k^{-3}),$$

gdzie γ jest stałą.

Zastępując w (3.2) $L(\vec{k})$ przez $L(\xi\vec{k})$, $\xi \neq 0$, $\xi \in \mathbb{R}$, zmieniając zmienne $\vec{k} \to \frac{1}{\xi}\vec{k}'$ oraz pamiętając o ewentualnym odwróceniu granic (dla ujemnych ξ) otrzymujemy

$$\int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} \frac{L(\xi \vec{k})}{k^2} = |\xi|^{-1},$$

skąd od razu dostajemy kolejną własność (w oczywisty sposób zgodną z (3.3))

$$L(\xi \vec{k}) = |\xi|^{-1} L(\vec{k}), \quad \xi \neq 0, \quad \xi \in \mathbb{R}. \tag{3.5}$$

Widzimy również, że sprzężenie zespolone spełnia te same równania zatem

$$L^*(\vec{k}) = L(\vec{k}). \tag{3.6}$$

Przesunięcie o stały, skończony wektor $\vec{k}_0$ nie zmienia całki (3.2) ze względu na równość (3.1), a więc

$$L(\vec{k} - \vec{k}_0) = L(\vec{k}). \tag{3.7}$$

W oczywisty sposob widać, że całkę z (3.2) możemy rozbić na całkę po skończonej kuli i dopełnieniu do całej przestrzeni $\vec{k}$. Z własności (3.1) całka po kuli o skończonym promieniu znika. Z kolei całka po dopełnieniu skończonej kuli równa jest całce po całej przestrzeni co prowadzi nas do tego samego wyniku - (3.2). W ogólności, tak jak w przypadku $\Lambda(\vec{k})$, całki po całej przestrzeni $\vec{k}$ zawierające $L(\vec{k})$ możemy zapisywać jako sumę całek po dopełniających się wzajemnie do całej przestrzeni $\vec{k}$ podprzestrzeniach, jeśli nieskończony wektor $\vec{k}$ jest elementem całkowania po tylko jednej z tych podprzestrzeni.

Weźmy teraz transformatę Fouriera dystrybucji $L(\vec{k})$

$$l(\vec{r}) \equiv \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} L(\vec{k}) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}. \tag{3.8}$$

Wstawiając do (3.2) transformatę odwrotną

$$L(\vec{k}) = \int \mathrm{d}^3 r\, l(\vec{r}) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}, \tag{3.9}$$

otrzymujemy kolejno

$$\int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} \frac{L(\vec{k})}{k^2} = \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{k^2} \int \mathrm{d}^3 r\, l(\vec{r}) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}} = \int \frac{\mathrm{d}^3 r}{(2\pi)^3} l(\vec{r}) \int \mathrm{d}^3 k \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}}{k^2} = 1.$$

Całka po $\vec{k}$ była już przez nas obliczana przy okazji omawiania własności dystrybucji $\Lambda(\vec{k})$ i wykorzystywana przy badaniu jej transformaty Fouriera $\lambda(\vec{r})$ dlatego podamy tylko jej wynik: $\frac{2\pi^2}{r}$. Uwzględniając ten wynik w powyższym równaniu widzimy, że zachodzi następująca równość

$$\int \mathrm{d}^3 r \frac{l(\vec{r})}{r} = 4\pi. \tag{3.10}$$

Zauważmy, że możemy zapisać ciąg następujących równości

$$\int \mathrm{d}^3 r\, l(\vec{r}) f(\vec{r}) = \int \frac{\mathrm{d}^3 k' \mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} L(\vec{k}') \tilde{f}(\vec{k}) \int \frac{\mathrm{d}^3 r}{(2\pi)^3} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\vec{k}'+\vec{k})\cdot\vec{r}} =$$

$$= \int \frac{\mathrm{d}^3 k' \mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} L(\vec{k}') \tilde{f}(\vec{k}) \delta(\vec{k}' + \vec{k}) \overset{(3.3)}{=} \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} L(\vec{k}) \tilde{f}(\vec{k}) \overset{(3.4)}{=} \lim_{k\to\infty} k^2 \tilde{f}(\vec{k}) = \gamma.$$

Mamy ponadto

$$f(\vec{r}) = \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} \tilde{f}(\vec{k}) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}} = \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} \left[\frac{\gamma}{k^2} + \mathcal{O}(k^{-3}) \right] \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}} = \frac{\gamma}{4\pi r} + h(\vec{r}),$$

gdzie

$$\lim_{\vec{r}\to 0} rh(\vec{r}) = 0.$$

Otrzymaliśmy kolejno

$$\int \mathrm{d}^3 r l(\vec{r}) f(\vec{r}) = \int \mathrm{d}^3 r l(\vec{r}) \left[\frac{\gamma}{4\pi r} + h(\vec{r})\right] = \gamma + \int \mathrm{d}^3 r l(\vec{r}) h(\vec{r}),$$

$$\int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} L(\vec{k}) \widetilde{f}(\vec{k}) = \lim_{\vec{k}\to\infty} k^2 \widetilde{f}(\vec{k}) = \gamma,$$

$$\int \mathrm{d}^3 r l(\vec{r}) f(\vec{r}) = \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} L(\vec{k}) \widetilde{f}(\vec{k}) \Longrightarrow \int \mathrm{d}^3 r l(\vec{r}) h(\vec{r}) = 0 = \lim_{\vec{r}\to 0} rh(\vec{r}).$$

Zauważając jeszcze, że

$$\int \mathrm{d}^3 r l(\vec{r}) f(\vec{r}) = \int \mathrm{d}^3 r l(\vec{r}) \left[\frac{\gamma}{4\pi r} + h(\vec{r})\right] = \int \mathrm{d}^3 r l(\vec{r}) \frac{\gamma}{4\pi r} \stackrel{(3.10)}{=} \gamma = \lim_{\vec{r}\to 0} 4\pi r f(\vec{r}),$$

dostajemy ważną własnośc dystrybucji $l(\vec{r})$

$$\int \mathrm{d}^3 r l(\vec{r}) f(\vec{r}) = \lim_{\vec{r}\to 0} 4\pi r f(\vec{r}). \tag{3.11}$$

Rozpisując całkę z wyrażenia (3.11) w następujący sposób

$$\int \mathrm{d}^3 r l(\vec{r}) f(\vec{r}) = \int \mathrm{d}^3 r \frac{l(\vec{r})}{4\pi r} 4\pi r f(\vec{r}),$$

wyciągamy wniosek o nośniku $l(\vec{r})$

$$l(\vec{r}) = 0, \quad \vec{r} \neq 0. \tag{3.12}$$

Biorąc teraz $f(\vec{r}) = 1$ dostajemy

$$\int \mathrm{d}^3 r l(\vec{r}) = 0. \tag{3.13}$$

Z postaci (3.8) oraz z parzystości $L(\vec{k})$ otrzymujemy

$$l^*(\vec{r}) = l(-\vec{r}) = l(\vec{r}), \tag{3.14}$$

a także (postępując jak w każdym innym tego typu przypadku)

$$l(\xi\vec{r}) = |\xi|^{-2} l(\vec{r}), \quad \xi \neq 0, \quad \xi \in \mathbb{R}. \tag{3.15}$$

Gdy $\vec{k}$ to wektor falowy wymiarem $l(\vec{r})$ jest [długość]$^{-2}$.

Jak poprzednio zbieramy wszystkie własności $L(\vec{k})$ oraz $l(\vec{r})$

xvii) $L(\vec{k}) = 0, \quad k < \infty,$

xviii) $\displaystyle\int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} \frac{L(\vec{k})}{k^2} = 1,$

xix) $\displaystyle\int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} L(\vec{k}) \widetilde{f}(\vec{k}) = \lim_{\vec{k}\to\infty} k^2 \widetilde{f}(\vec{k}),$

xx) $L(\xi\vec{k}) = |\xi|^{-1} L(\vec{k}), \quad \xi \neq 0, \quad \xi \in \mathbb{R},$

xxi) $L^*(\vec{k}) = L(\vec{k})$,

xxii) $L(\vec{k} - \vec{k}_0) = L(\vec{k})$,

xxiii) $\int \mathrm{d}^3 r \frac{l(\vec{r})}{r} = 4\pi$,

xxiv) $\int \mathrm{d}^3 r\, l(\vec{r}) f(\vec{r}) = \lim_{\vec{r}\to 0} 4\pi r f(\vec{r})$,

xxv) $l(\vec{r}) = 0, \quad \vec{r} \neq 0$,

xxvi) $\int \mathrm{d}^3 r\, l(\vec{r}) = 0$,

xxvii) $l^*(\vec{r}) = l(-\vec{r}) = l(\vec{r})$,

xxviii) $l(\xi\vec{r}) = |\xi|^{-2} l(\vec{r}), \quad \xi \neq 0, \quad \xi \in \mathbb{R}$.

3.2 Wprowadzenie do selektorów krótkiego zasięgu

Weźmy dwie zwykłe funkcje $f_1(\vec{k})$ oraz $f_2(\vec{k})$ spełniające następujące równości

$$\int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} f_1(\vec{k}) = 1, \tag{3.16}$$

$$f_2(\vec{k}) = \frac{1}{k^2} + r'(\vec{k}), \quad \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} r'(\vec{k}) = 0. \tag{3.17}$$

Weźmy ponadto

$$s_1(\vec{k}) = \Lambda(\vec{k}), \quad s_2(\vec{k}) = L(\vec{k}). \tag{3.18}$$

By równania (3.16) i (3.17) mogły być spełnione, funkcje $f_1(\vec{k})$ oraz $r'(\vec{k})$ muszą przy $\vec{k} \to \infty$ znikać szybciej niż k^{-3}.

Funkcje $f_1(\vec{k})$ oraz $f_2(\vec{k})$ są liniowo niezależne i rozpinają przestrzeń liniową $\mathcal{F}$. Podobnie $s_1(\vec{k})$ i $s_2(\vec{k})$ (de facto $\Lambda(\vec{k})$ i $L(\vec{k})$) napinają inną przestrzeń liniową $\mathcal{S}$. Korzystając z równości (3.16) - (3.18) oraz własności **iii)**, **xviii)**, a także **xix)** zauważamy, że następujące całki wynoszą (korzystamy również rzeczywistości dystrybucji $\Lambda(\vec{k})$ i $L(\vec{k})$ oraz z zachowania $f_1(\vec{k})$ i $r'(\vec{k})$ dla $\vec{k} \to \infty$)

$$\int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} s_1^*(\vec{k}) f_1(\vec{k}) = \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} \Lambda(\vec{k}) f_1(\vec{k}) = \lim_{\mathcal{K}\to\infty} \int_{k\leqslant\mathcal{K}} \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} f_1(\vec{k}) = 1,$$

$$\int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} s_2^*(\vec{k}) f_2(\vec{k}) = \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} L(\vec{k}) f_2(\vec{k}) = \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} L(\vec{k}) \left(\frac{1}{k^2} + r'(\vec{k})\right) = 1 + \lim_{\vec{k}\to\infty} k^2 r'(\vec{k}) = 1,$$

$$\int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} s_1^*(\vec{k}) f_2(\vec{k}) = \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} \Lambda(\vec{k}) f_2(\vec{k}) = \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} \frac{\Lambda(\vec{k})}{k^2} + \lim_{\mathcal{K}\to\infty} \int_{k\leqslant\mathcal{K}} \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} r'(\vec{k}) = 0,$$

$$\int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} s_2^*(\vec{k}) f_1(\vec{k}) = \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} L(\vec{k}) f_1(\vec{k}) = \lim_{\vec{k}\to\infty} k^2 f_1(\vec{k}) = 0.$$

Powyższe wyniki możemy zapisać w zwartej postaci

$$\int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} s_i^*(\vec{k}) f_j(\vec{k}) = \delta_{ij}. \tag{3.19}$$

Widzimy zatem, że $\mathcal{F}$ i $\mathcal{S}$ są wzajemnie dualne. Weźmy dowolną funkcję $f(\vec{k})$ z przestrzeni $\mathcal{F}$

$$f(\vec{k}) = \sum_{i=1}^{2} c_i f_i(\vec{k}).$$

Zgodnie z (3.19) używając $s_j(\vec{k})$ (czyli zdefiniowanych przez nas elementów z $\mathcal{S}$) możemy wydobyć współczynniki c_j

$$\int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} s_j^*(\vec{k}) f(\vec{k}) = c_j.$$

Z tego powodu elementy przestrzeni $\mathcal{S}$ nazywać będziemy selektorami.

Weźmy jeszcze transformaty Fouriera funkcji $f_i(\vec{k})$ i selektorów $s_i(\vec{k})$

$$\widetilde{f}_i(\vec{r}) = \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} f_i(\vec{k}) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}, \quad \widetilde{s}_i(\vec{r}) = \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} s_i(\vec{k}) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}.$$

Ponieważ

$$\int \mathrm{d}^3 r \widetilde{s}_i^*(\vec{r}) \widetilde{f}_j(\vec{r}) = \int \frac{\mathrm{d}^3 k \mathrm{d}^3 k'}{(2\pi)^3} s_i^*(\vec{k}') f_j(\vec{k}) \int \frac{\mathrm{d}^3 r}{(2\pi)^3} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}} = \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} s_i^*(\vec{k}) f_j(\vec{k}),$$

na mocy równości (3.19) otrzymujemy

$$\int \mathrm{d}^3 r \widetilde{s}_i^*(\vec{r}) \widetilde{f}_j(\vec{r}) = \delta_{ij}. \tag{3.20}$$

Powyższa równość jest oczywiście spójna z własnościami transformat selektorów

$$\int \mathrm{d}^3 r \lambda(\vec{r}) \overset{\textbf{xiii)}}{=} 1, \quad \int \mathrm{d}^3 r \frac{\lambda(\vec{r})}{4\pi r} \overset{\textbf{xii)}}{=} 0, \tag{3.21}$$

$$\int \mathrm{d}^3 r l(\vec{r}) \overset{\textbf{xxvi)}}{=} 0, \quad \int \mathrm{d}^3 r \frac{l(\vec{r})}{4\pi r} \overset{\textbf{xxiv)}}{=} 1. \tag{3.22}$$

Oczywiście zachodzi również

$$\widetilde{s}_i(\vec{r}) = 0, \quad \vec{r} \neq 0. \tag{3.23}$$

Widzimy stąd, że $\widetilde{s}(\vec{r})$ pozwalają na wyodrębnienie własności funkcji $\widetilde{f}(\vec{r})$ w okolicach $\vec{r} = 0$ (efektywnie w $\vec{r} = 0$). Z tego powodu elementy te nazywać będziemy selektorami krótkiego zasięgu.

Poniżej zebrano najważniejsze wyniki

xxix) $\displaystyle\int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} f_1(\vec{k}) = 1,$

xxx) $\displaystyle f_2(\vec{k}) = \frac{1}{k^2} + r'(\vec{k}), \quad \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} r'(\vec{k}) = 0,$

xxxi) $s_1(\vec{k}) = \Lambda(\vec{k}), \quad s_2(\vec{k}) = L(\vec{k}),$

xxxii) $\displaystyle\int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} s_i^*(\vec{k}) f_j(\vec{k}) = \delta_{ij},$

xxxiii) $\int \frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3} s_j^*(\vec{k}) f(\vec{k}) = c_j, \quad f(\vec{k}) = \sum_{i=1}^{2} c_i f_i(\vec{k}),$

xxxiv) $\int \mathrm{d}^3r \widetilde{s}_i^*(\vec{r}) \widetilde{f}_j(\vec{r}) = \delta_{ij}, \quad \widetilde{f}_i(\vec{r}) = \int \frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3} f_i(\vec{k}) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}, \quad \widetilde{s}_i(\vec{r}) = \int \frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3} s_i(\vec{k}) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}},$

xxxv) $\int \mathrm{d}^3r \lambda(\vec{r}) = 1, \quad \int \mathrm{d}^3r \frac{\lambda(\vec{r})}{4\pi r} = 0,$

xxxvi) $\int \mathrm{d}^3r\, l(\vec{r}) = 0, \quad \int \mathrm{d}^3r \frac{l(\vec{r})}{4\pi r} = 1,$

xxxvii) $\widetilde{s}_i(\vec{r}) = 0, \quad \vec{r} \neq 0.$

3.3 Selektor η

Definiujemy selektor $\eta(\vec{k})$ jako

$$\eta(\vec{k}) \equiv \Lambda(\vec{k}) + \frac{L(\vec{k})}{4\pi a}. \tag{3.24}$$

Jego transformata Fouriera to oczywiście

$$\widetilde{\eta}(\vec{r}) = \int \frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3} \eta(\vec{k}) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}} = \lambda(\vec{r}) + \frac{l(\vec{r})}{4\pi a}. \tag{3.25}$$

Wycałkujmy po całej przestrzeni $\vec{r}$ równanie (1.34) z selektorem $\widetilde{\eta}(\vec{r})$

$$\int \mathrm{d}^3r \widetilde{\eta}(\vec{r}) \left[B_0(t) \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{a} \right) + \mathcal{O}(r) \right] =$$

$$= B_0(t) \int \mathrm{d}^3r \left(\frac{\lambda(\vec{r})}{r} + \frac{l(\vec{r})}{4\pi a r} - \frac{\lambda(\vec{r})}{a} - \frac{l(\vec{r})}{4\pi a^2} \right) + \int \mathrm{d}^3r \left(\lambda(\vec{r}) + \frac{l(\vec{r})}{4\pi a} \right) \mathcal{O}(r).$$

Pierwsza całka wprost z dwóch własności **xii)**, **xv)** dystrybucji $\lambda(\vec{r})$ oraz dwóch własności **xxiii)**, **xxvi)** dystrybucji $l(\vec{r})$ wynosi zero. Podobnie druga całka znika z własności **xiii)** i **xxiv)**. Otrzymujemy zatem bardzo istotną własność selektora $\widetilde{\eta}(\vec{r})$

$$\int \mathrm{d}^3r \widetilde{\eta}(\vec{r}) \psi_s(\vec{r}) = \int \mathrm{d}^3r \widetilde{\eta}(\vec{r}) \left[B_0(t) \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{a} \right) + \mathcal{O}(r) \right] = 0. \tag{3.26}$$

Widzimy bowiem, że selektor $\widetilde{\eta}(\vec{r})$ anihiluje funkcję falową ruchu względnego przy oddziaływaniach kontaktowych (patrz punkt 1.4).

Korzystając jeszcze raz z własności **xiii)** i **xxiv)** oraz zakładając, że funkcja $f(\vec{r})$ jest dobrze określona w otoczeniu $r = 0$ dostajemy

$$\int \mathrm{d}^3r \widetilde{\eta}(\vec{r}) f(\vec{r}) = \int \mathrm{d}^3r \left(\lambda(\vec{r}) + \frac{l(\vec{r})}{4\pi a} \right) f(\vec{r}) = f(0). \tag{3.27}$$

Otrzymujemy stąd od razu kolejną własność, wynikającą oczywiście także z równości (3.25) - nośnik dystrybucji $\lambda(\vec{r})$ i $l(\vec{r})$

$$\widetilde{\eta}(\vec{r}) = 0, \quad \vec{r} \neq 0. \tag{3.28}$$

Podobnie z rzeczywistości i parzystości $\lambda(\vec{r})$ i $l(\vec{r})$, a także własności **xii)** i **xxvi)** otrzymujemy

$$\widetilde{\eta}^*(\vec{r}) = \widetilde{\eta}(\vec{r}) = \widetilde{\eta}(-\vec{r}), \tag{3.29}$$

$$\int \mathrm{d}^3 r \tilde{\eta}(\vec{r})\hat{r} = 0. \tag{3.30}$$

Biorąc wyrażenie (3.24) oraz własności **ii)** i **xvii)** zauważamy, że

$$\eta(\vec{k}) = 1, \quad k < \infty. \tag{3.31}$$

Ponadto z **iii)** oraz **xviii)** dostajemy kolejną równość dla $\eta(\vec{k})$

$$\int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} \frac{\eta(\vec{k})}{k^2} = \frac{1}{4\pi a}. \tag{3.32}$$

Na koniec rozważmy jeszcze następującą całkę

$$\int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3}\eta(\vec{k})f(\vec{k}) = \int\limits_{k<\mathcal{K}} \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3}\eta(\vec{k})f(\vec{k}) + \int\limits_{k>\mathcal{K}} \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3}\eta(\vec{k})f(\vec{k}),$$

gdzie rozbicie na całki po kuli o promieniu $\mathcal{K}$ i jej dopełnieniu do pełnej przestrzeni $\vec{k}$ jest uprawnione przez własności dystrybucji $\Lambda(\vec{k})$ i $L(\vec{k})$. Załóżmy ponadto odpowiednie zachowanie funkcji $f(\vec{k})$ - znikanie jak k^{-2} lub szybciej - (patrz punkt 3.1). W związku z równością (3.31) oraz zachowaniem $f(\vec{k})$ mamy

$$\int\limits_{k<\mathcal{K}} \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3}\eta(\vec{k})f(\vec{k}) = \int\limits_{k<\mathcal{K}} \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3}f(\vec{k}),$$

$$\int\limits_{k>\mathcal{K}} \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3}\eta(\vec{k})f(\vec{k}) = \int\limits_{k>\mathcal{K}} \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3}\eta(\vec{k})\left[\frac{\gamma}{k^2} + \mathcal{O}(k^{-3})\right],$$

gdzie $\mathcal{K}$ jest duże. Do drugiej całki dodajmy zero postaci

$$\int\limits_{k<\mathcal{K}} \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3}\eta(\vec{k})\frac{\gamma}{k^2} - \int\limits_{k<\mathcal{K}} \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3}\eta(\vec{k})\frac{\gamma}{k^2} \overset{(3.31)}{=} \int\limits_{k<\mathcal{K}} \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3}\eta(\vec{k})\frac{\gamma}{k^2} - \int\limits_{k<\mathcal{K}} \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3}\frac{\gamma}{k^2} = 0.$$

Otrzymujemy kolejno

$$\int\limits_{k>\mathcal{K}} \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3}\eta(\vec{k})f(\vec{k}) = \int\limits_{k>\mathcal{K}} \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3}\eta(\vec{k})\left[\frac{\gamma}{k^2} + \mathcal{O}(k^{-3})\right] + \int\limits_{k<\mathcal{K}} \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3}\eta(\vec{k})\frac{\gamma}{k^2} - \int\limits_{k<\mathcal{K}} \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3}\frac{\gamma}{k^2} =$$

$$= \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3}\left[\Lambda(\vec{k}) + \frac{L(\vec{k})}{4\pi a}\right]\frac{\gamma}{k^2} - \int\limits_{k<\mathcal{K}} \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3}\frac{\gamma}{k^2} + \int\limits_{k>\mathcal{K}} \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3}\eta(\vec{k})\mathcal{O}(k^{-3}).$$

Z własności **iii)** całka z dystrybucją $\Lambda(\vec{k})$ znika. Mamy zatem

$$\int\limits_{k>\mathcal{K}} \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3}\eta(\vec{k})f(\vec{k}) = \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3}\frac{L(\vec{k})}{4\pi a}\frac{\gamma}{k^2} - \int\limits_{k<\mathcal{K}} \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3}\frac{\gamma}{k^2} + \int\limits_{k>\mathcal{K}} \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3}\eta(\vec{k})\mathcal{O}(k^{-3}) \overset{\mathrm{xviii)}}{=}$$

$$= \frac{\gamma}{4\pi a} - \int\limits_{k<\mathcal{K}} \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3}\frac{\gamma}{k^2} + \int\limits_{k>\mathcal{K}} \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3}\eta(\vec{k})\mathcal{O}(k^{-3}).$$

Możemy przy tym zapisać $\gamma = \lim\limits_{\vec{k}\to\infty} k^2 f(\vec{k})$. Łącząc otrzymane wyrażenia dostajemy

$$\int \frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\eta(\vec{k})f(\vec{k}) = \frac{\gamma}{4\pi a} + \int\limits_{k<\mathcal{K}} \frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\left[f(\vec{k}) - \frac{\gamma}{k^2}\right] + \int\limits_{k>\mathcal{K}} \frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\eta(\vec{k})\mathcal{O}(k^{-3}).$$

Korzystając z tego, że $\mathcal{K} \to \infty$ (jest to uprawnione gdyż $f(\vec{k}) - \gamma/k^2$ znika nie wolniej niż k^{-3}) otrzymujemy

$$\int \frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\eta(\vec{k})f(\vec{k}) = \frac{\gamma}{4\pi a} + \lim_{\mathcal{K}\to\infty} \int\limits_{k<\mathcal{K}} \frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\left[f(\vec{k}) - \frac{\gamma}{k^2}\right]. \tag{3.33}$$

Poniżej zestawiamy otrzymane własności $\eta(\vec{k})$ i $\widetilde{\eta}(\vec{r})$

xxxviii) $\eta(\vec{k}) \equiv \Lambda(\vec{k}) + \dfrac{L(\vec{k})}{4\pi a}$,

xxxix) $\widetilde{\eta}(\vec{r}) = \displaystyle\int \frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\eta(\vec{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}} = \lambda(\vec{r}) + \frac{l(\vec{r})}{4\pi a}$,

xl) $\displaystyle\int \mathrm{d}^3r\widetilde{\eta}(\vec{r})\psi_s(\vec{r}) = \int \mathrm{d}^3r\widetilde{\eta}(\vec{r})\left[B_0(t)\left(\frac{1}{r} - \frac{1}{a}\right) + \mathcal{O}(r)\right] = 0$,

xli) $\displaystyle\int \mathrm{d}^3r\widetilde{\eta}(\vec{r})f(\vec{r}) = f(0)$,

xlii) $\widetilde{\eta}(\vec{r}) = 0, \quad \vec{r} \neq 0$,

xliii) $\widetilde{\eta}^*(\vec{r}) = \widetilde{\eta}(\vec{r}) = \widetilde{\eta}(-\vec{r})$,

xliv) $\displaystyle\int \mathrm{d}^3r\widetilde{\eta}(\vec{r})\hat{r} = 0$,

xlv) $\eta(\vec{k}) = 1, \quad k < \infty$,

xlvi) $\displaystyle\int \frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\frac{\eta(\vec{k})}{k^2} = \frac{1}{4\pi a}$,

xlvii) $\displaystyle\int \frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\eta(\vec{k})f(\vec{k}) = \frac{\gamma}{4\pi a} + \lim_{\mathcal{K}\to\infty} \int\limits_{k<\mathcal{K}} \frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\left[f(\vec{k}) - \frac{\gamma}{k^2}\right], \quad \gamma = \lim_{\vec{k}\to\infty} k^2 f(\vec{k})$.

Rozdział 4

Twierdzenie o energii

4.1 Sformułowanie matematyczne

Przed podaniem twierdzenia zdefiniujemy ułatwiające zapis wielkości

$$\mathcal{C} \equiv \lim_{\vec{k}\to\infty} k^4 n_{\vec{k}\uparrow} = \lim_{\vec{k}\to\infty} k^4 n_{\vec{k}\downarrow}, \quad n_{\vec{k}\sigma} \equiv \left\langle \hat{a}^{\dagger}_{\vec{k}\sigma}\hat{a}_{\vec{k}\sigma} \right\rangle, \tag{4.1}$$

gdzie $\hat{a}_{\vec{k}\sigma}$ to standardowy operator anihilacji dla fermionów o wektorze falowym $\vec{k}$ i spinie σ. Widzimy, że z definicji $n_{\vec{k}\sigma}$ jest średnią liczbą fermionów o liczbach kwantowych $\vec{k}$ i σ w stanie, w którym znajduje się układ. Wielkość $\mathcal{C}$, którą wyprowadzamy w następnym punkcie 4.2 to tzw. ***kontakt***. Pokazujemy w nim również, że $\mathcal{C}$ nie zależy od σ.

Twierdzenie o energii

Niech układ, znajdujący się w gładkim potencjale zewnętrznym $\mathcal{V}_{ext}(\vec{r})$, składa się z fermionów o równych masach m, zapełniających dwa stany spinowe $(\uparrow, \downarrow)$ w kontaktowym oddziaływaniu z długością rozpraszania równą a. Niech ponadto wyrażenie (macierz gęstości)

$$\hat{\rho} = \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i \left|\phi_i\right\rangle \left\langle\phi_i\right|, \quad \left\langle\phi_i|\phi_j\right\rangle = \delta_{ij}, \quad \sum_{i=1}^{\infty}\alpha_i = 1, \tag{4.2}$$

spełnia dwa warunki:

1. $|\phi_i\rangle$ są liniowymi kombinacjami stanów własnych hamiltonianu układu (stanów własnych energii) ze współczynnikami rozkładu zanikającymi wystarczająco szybko dla wysokich energii - tak by funkcja falowa ϕ_i w reprezentacji położeń nie miała innych osobliwości niż te wynikające z oddziaływań pomiędzy fermionami,

2. prawdopodobieństwo α_i zanika wystarczająco szybko ze wzrostem i tak, że

$$\mathcal{C} = \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i \mathcal{C}_i, \tag{4.3}$$

   gdzie $\mathcal{C}$ i $\mathcal{C}_i$, zdefiniowane przez (4.1), są powiązane odpowiednio z $\hat{\rho}$ i $|\phi_i\rangle$ poprzez równości określające $n_{\vec{k}\sigma}$ oraz $n_{i,\vec{k}\sigma}$

$$n_{\vec{k}\sigma} = \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i \left\langle\phi_i\right| \hat{a}^{\dagger}_{\vec{k}\sigma}\hat{a}_{\vec{k}\sigma} \left|\phi_i\right\rangle, \tag{4.4}$$

$$n_{i,\vec{k}\sigma} = \left\langle\phi_i\right| \hat{a}^{\dagger}_{\vec{k}\sigma}\hat{a}_{\vec{k}\sigma} \left|\phi_i\right\rangle. \tag{4.5}$$

W przypadku spełnienia powyższych założeń oczekiwana energia układu jest równa

$$E = \sum_{\vec{k},\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \eta(\vec{k}) n_{\vec{k}\sigma} + \sum_{\sigma} \int \mathrm{d}^3 r \mathcal{V}_{ext}(\vec{r}) \rho_\sigma(\vec{r}), \tag{4.6}$$

gdzie $\eta(\vec{k})$ to selektor zdefiniowany przez (3.24) (patrz punkt 3.3), a $\rho_\sigma(\vec{r})$ jest przestrzennym rozkładem gęstości.

Dowód

Zauważamy, że wyrażenie (4.6) składa się z dwóch członów. Człon $\sum_\sigma \int \mathrm{d}^3 r \mathcal{V}_{ext}(\vec{r})\rho_\sigma(\vec{r})$ odpowiada energii oddziaływania układu z polem $\mathcal{V}_{ext}(\vec{r})$. Wystarczy się zatem zająć wyrażeniem $\sum_{\vec{k},\sigma} \eta(\vec{k}) n_{\vec{k}\sigma} k^2/2m$. Jest to energia wewnętrzna E_{int}, która fizycznie jest sumą energii kinetycznych fermionów oraz energii oddziaływań między nimi. Obie sumy są rozbieżne w granicy oddziaływań kontaktowych (o zerowym zasięgu). Jednakże energia E_{int} jest jednoznacznie określona w granicy $r_0 \to 0$ jeśli użyjemy metody pseudopotencjału (patrz punkt 1.2) - wtedy $a \neq 0$ jest ustalone.

Rozważmy przypadek, w którym układ znajduje się w czystym stanie własnym energii $|\phi\rangle$ (bądź takiej superpozycji stanów, że nie ma innych osobliwości niż te wynikajace z oddziaływania kontaktowego), w którym dokładnie $\mathcal{N}$ fermionów ma spin skierowany w górę $\uparrow$, a dokładnie $\mathcal{M}$ fermionów ma spin skierowany w dół $\downarrow$

$$|\phi\rangle = \int \mathrm{d}^3 r_1 \ldots \mathrm{d}^3 r_{\mathcal{N}} \mathrm{d}^3 s_1 \ldots \mathrm{d}^3 s_{\mathcal{M}} \langle \vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_{\mathcal{N}}, \vec{s}_1, \ldots, \vec{s}_{\mathcal{M}} | \phi \rangle \, |\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_{\mathcal{N}}, \vec{s}_1, \ldots, \vec{s}_{\mathcal{M}}\rangle . \tag{4.7}$$

Funkcja

$$\langle \vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_{\mathcal{N}}, \vec{s}_1, \ldots, \vec{s}_{\mathcal{M}} | \phi \rangle = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}!\mathcal{M}!}} \phi(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_{\mathcal{N}}, \vec{s}_1, \ldots, \vec{s}_{\mathcal{M}}), \tag{4.8}$$

jest całkowicie antysymetryczna ze względu na zamianę każdych dwóch fermionów w tym samym stanie spinowym. Jest ona również poprawnie znormalizowana

$$\frac{1}{\mathcal{N}!\mathcal{M}!} \int \mathrm{d}^3 r_1 \ldots \mathrm{d}^3 r_{\mathcal{N}} \mathrm{d}^3 s_1 \ldots \mathrm{d}^3 s_{\mathcal{M}} \, |\phi(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_{\mathcal{N}}, \vec{s}_1, \ldots, \vec{s}_{\mathcal{M}})|^2 = 1. \tag{4.9}$$

Korzystając ponadto z (1.56) otrzymujemy

$$\begin{aligned} |\phi\rangle = \frac{1}{\mathcal{N}!\mathcal{M}!} \int & \mathrm{d}^3 r_1 \ldots \mathrm{d}^3 r_{\mathcal{N}} \mathrm{d}^3 s_1 \ldots \mathrm{d}^3 s_{\mathcal{M}} \phi(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_{\mathcal{N}}, \vec{s}_1, \ldots, \vec{s}_{\mathcal{M}}) \\ & \times \hat{\psi}^\dagger_\uparrow(\vec{r}_1) \ldots \hat{\psi}^\dagger_\uparrow(\vec{r}_{\mathcal{N}}) \hat{\psi}^\dagger_\downarrow(\vec{s}_1) \ldots \hat{\psi}^\dagger_\downarrow(\vec{s}_{\mathcal{M}}) \, |0\rangle , \end{aligned} \tag{4.10}$$

gdzie $\hat{\psi}_\sigma(\vec{r})$ jest operatorem pola fermionowego (1.46) (patrz punkt 1.5). Oczywiście w związku z normalizacją $|\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_{\mathcal{N}}, \vec{s}_1, \ldots, \vec{s}_{\mathcal{M}}\rangle$ oraz $\langle \vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_{\mathcal{N}}, \vec{s}_1, \ldots, \vec{s}_{\mathcal{M}} | \phi \rangle$ zachodzi również $\langle \phi | \phi \rangle = 1$.

Wspomiana wcześniej rozbieżność energii kinetycznej w granicy oddziaływań kontaktowych, wynika z działania operatora energii kinetycznej (proporcjonalnej do $3\mathcal{N} + 3\mathcal{M}$ wymiarowego laplasjanu) na funkcję falową (1.34), bo

$$-\frac{\hbar^2}{m} \nabla^2 \left(\frac{1}{r}\right) = \frac{4\pi\hbar^2}{m} \delta(\vec{r}). \tag{4.11}$$

By usunąć osobliwość, pojawiającej się w powyższym wyrażeniu delty Diraca stosujemy metodę pseudopotencjału. Pokażemy to wprost rozpisując lewą stronę (1.3) z pseudopotencjałem (1.14) i funkcją falową dla oddziaływań kontaktowych (1.34) w przypadku dwóch fermionów o masie m i przeciwnych rzutach spinu

$$\left(-\frac{\hbar^2}{m}\nabla^2+\frac{4\pi\hbar^2 a}{m}\delta(\vec{r})\frac{\partial}{\partial r}r\right)\left[B_0\left(\frac{1}{r}-\frac{1}{a}\right)+\mathcal{O}(r)\right]=$$

$$=B_0\frac{4\pi\hbar^2}{m}\delta(\vec{r})-\frac{\hbar^2}{m}\nabla^2\mathcal{O}(r)-B_0\frac{4\pi\hbar^2}{m}\delta(\vec{r})=-\frac{\hbar^2}{m}\nabla^2\mathcal{O}(r).$$

W związku ze znoszeniem się istotnych w $r=0$ wkładów od energii kinetycznej oraz potencjalnej oddziaływania kontaktowego możemy ograniczyć się do wyrażania wartości oczekiwanej energii $E_{int}=\langle\phi|\,\hat{H}\,|\phi\rangle$ nie jako całki po całej przestrzeni z pełnego hamiltonianu $\hat{H}=\hat{T}+\hat{V}$

$$E_{int}=\frac{1}{\mathcal{N}!\mathcal{M}!}\int \mathrm{d}^{3\mathcal{N}+3\mathcal{M}}\mathcal{R}\phi^*\left(\vec{\mathcal{R}}\right)\left[\hat{T}+\hat{V}\right]\phi\left(\vec{\mathcal{R}}\right),$$

a jedynie do

$$E_{int}=\frac{1}{\mathcal{N}!\mathcal{M}!}\lim_{\epsilon\to 0}\int\limits_{\mathcal{D}(\epsilon)} \mathrm{d}^{3\mathcal{N}+3\mathcal{M}}\mathcal{R}\phi^*\left(\vec{\mathcal{R}}\right)\hat{T}\phi\left(\vec{\mathcal{R}}\right),$$

gdzie $\vec{\mathcal{R}}=\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_{\mathcal{N}},\vec{s}_1,\ldots,\vec{s}_{\mathcal{M}}$, a $\mathcal{D}(\epsilon)$ jest $3\mathcal{N}+3\mathcal{M}$ wymiarową podprzestrzenią konfiguracyjną, nie zawierającą regionów, w których dowolne dwa fermiony z przeciwnymi spinami zbliżają się do siebie na dystans mniejszy niż ϵ. Operator energii kinetycznej $\hat{T}$ w reprezentacji położeń ma postać

$$\hat{T}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2_{3\mathcal{N}+3\mathcal{M}},\tag{4.12}$$

gdzie $\nabla^2_{3\mathcal{N}+3\mathcal{M}}$ jest $3\mathcal{N}+3\mathcal{M}$ wymiarowym operatorem Laplace'a. Zapisujemy zatem ostatecznie

$$-\frac{2m}{\hbar^2}E_{int}=\frac{1}{\mathcal{N}!\mathcal{M}!}\lim_{\epsilon\to 0}\int\limits_{\mathcal{D}(\epsilon)} \mathrm{d}^{3\mathcal{N}+3\mathcal{M}}\mathcal{R}\phi^*\left(\vec{\mathcal{R}}\right)\nabla^2_{3\mathcal{N}+3\mathcal{M}}\phi\left(\vec{\mathcal{R}}\right).\tag{4.13}$$

Zdefiniujmy teraz pewną wielkość $\mathcal{X}$

$$-\frac{2m}{\hbar^2}\mathcal{X}=\frac{1}{\mathcal{N}!\mathcal{M}!}\int \mathrm{d}^{3\mathcal{N}+3\mathcal{M}}\mathcal{R}\mathrm{d}^3x\tilde{\eta}(\vec{x})\phi^*(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_{\mathcal{N}},\vec{s}_1,\ldots,\vec{s}_{\mathcal{M}})$$
$$\times\nabla^2_{\vec{x}}\left[\sum_{j=1}^{\mathcal{N}}\phi(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_{j-1},\vec{r}_j+\vec{x},\vec{r}_{j+1},\ldots,\vec{r}_{\mathcal{N}},\vec{s}_1,\ldots,\vec{s}_{\mathcal{M}})\right.$$
$$\left.+\sum_{q=1}^{\mathcal{M}}\phi(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_{\mathcal{N}},\vec{s}_1,\ldots,\vec{s}_{q-1},\vec{s}_q+\vec{x},\vec{s}_{q+1},\ldots,\vec{s}_{\mathcal{M}})\right].\tag{4.14}$$

Pokażemy, że $\mathcal{X}=E_{int}$. W tym celu w wyrażeniu (4.14) dzielimy $3\mathcal{N}+3\mathcal{M}$ wymiarową przestrzeń $\vec{\mathcal{R}}$ na podprzestrzeń $\mathcal{D}(\epsilon)$ oraz jej dopełnienie $\mathcal{I}(\epsilon)$. Całka po podprzestrzeni $\mathcal{D}(\epsilon)$ jest skończona i ciągła dla każdego $\vec{x}$, również gdy $x<\epsilon$. Zauważmy przy tym, że selektor $\tilde{\eta}(\vec{x})$, dla funkcji dobrze określonych w otoczeniu $x=0$, zachowuje się jak $\delta(\vec{x})$ - własność **xli**). Całkując zatem prawą stronę (4.14), ograniczoną do podprzestrzeni $\mathcal{D}(\epsilon)$, po d^3x otrzymujemy prawą stronę (4.13).

Dowód równości $\mathcal{X}=E_{int}$ wymaga jeszcze wykazania, że w granicy $\epsilon\to 0$, całka po podprzestrzeni $\mathcal{I}(\epsilon)$ znika. Zauważmy najpierw, że podprzestrzeń $\mathcal{I}(\epsilon)$ odpowiada rejonom, dla których $|\vec{r}_i-\vec{s}_j|<\epsilon,\quad i=1,\ldots,\mathcal{N},\quad j=1,\ldots,\mathcal{M}$. W przypadku dowolnych wartości ϵ rejony te mogą się oczywiście przecinać, co bardzo utrudnia wyznaczenie objętości podprzestrzeni $\mathcal{I}(\epsilon)$. W przypadku dostatecznie małych wartości ϵ przecięcia te przestaną mieć znaczenie, a w interesującej nas granicy $\epsilon\to 0$ znikną zupełnie. Wtedy objętość podprzestrzeni $\mathcal{I}(\epsilon)$ będzie proporcjonalna do ϵ^3. W związku z niezależnością rejonów $|\vec{r}_i - \vec{s}_j| < \epsilon$ możemy je wyekstrahować z $\mathcal{I}(\epsilon)$ dokonując w ten sposób dalszego podziału naszej podprzestrzeni konfiguracyjnej - $\mathcal{I}(\epsilon)$ dzielimy na $\mathcal{NM}$ takich samych rejonów $|\vec{r}_i - \vec{s}_j| < \epsilon, \quad i = 1, \ldots, \mathcal{N}, \quad j = 1, \ldots, \mathcal{M}$. Zauważmy ponadto, że w granicy termodynamicznej, przy dostatecznie małych ϵ, pary $\{\vec{r}_i, \vec{s}_j\}$ są wystarczająco daleko od siebie by każdą parę fermionów o przeciwnych spinach móc traktować niezależnie.

Powyższa dyskusja prowadzi nas do wniosku, że wystarczy zająć się jedynie jednym z takich samych $\mathcal{NM}$ rejonów, powiedzmy $|\vec{r}_1 - \vec{s}_1| < \epsilon$, gdyż wyniki dla każdego z nich są identyczne, a postępowanie przy wyborze innych rejonów jest w pełni analogiczne. W przypadku całki (4.14) z wyodrębnionym rejonem $|\vec{r}_1 - \vec{s}_1| < \epsilon \to 0$ tylko dwa elementy z dużego nawiasu moga dawać niezerowy wkład. Są to elementy, w których $\vec{r}_1$ zastąpiono przez $\vec{r}_1 + \vec{x}$ oraz $\vec{s}_1$ zastąpiono przez $\vec{s}_1 + \vec{x}$ (całki po wszystkich innych elementach są całkami zawierającymi wyrażenia typu $\int |\phi(\vec{r}_1, \vec{s}_1)|^2 \mathrm{d}^3 r_1 \mathrm{d}^3 s_1$, które znikają w granicy $\epsilon \to 0$).

W celu wykonania rachunku przeprowadzamy zamianę zmiennych

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{s}_1, \quad \vec{r}_0 = \frac{\vec{r}_1 + \vec{s}_1}{2},$$

i dla uproszczenia notacji zapisujemy resztę zmiennych jako: $\vec{\mathcal{R}}' = \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_{\mathcal{N}}, \vec{s}_2, \ldots, \vec{s}_{\mathcal{M}}$. Będziemy wykonywać najpierw całkę po $\vec{r}$, dla $r < \epsilon$ (ze względu na ograniczenie rejonu), a następnie kolejno po $\vec{x}$, $\vec{r}_0$ oraz $\vec{\mathcal{R}}'$. Funkcję $\phi\left(\vec{\mathcal{R}}\right) = \phi\left(\vec{\mathcal{R}}', \vec{r}_0, \vec{r}\right)$ możemy rozwinąć zgodnie z postacią (1.34) do wyrażenia

$$\phi\left(\vec{\mathcal{R}}', \vec{r}_0, \vec{r}\right) = A\left(\vec{\mathcal{R}}', \vec{r}_0\right)\left(\frac{1}{r} - \frac{1}{a}\right) + \mathcal{O}(r). \tag{4.15}$$

Definiujemy jeszcze następującą wielkość

$$\begin{aligned} K\left(\vec{\mathcal{R}}', \vec{r}_0, \vec{x}\right) \equiv \int\limits_{r<\epsilon} \mathrm{d}^3 r &\left[A^*\left(\vec{\mathcal{R}}', \vec{r}_0\right)\left(\frac{1}{r} - \frac{1}{a}\right) + \mathcal{O}(r)\right] \\ &\times \left[A\left(\vec{\mathcal{R}}', \vec{r}_0 + \vec{x}/2\right)\left(\frac{1}{|\vec{r} + \vec{x}|} - \frac{1}{a}\right) + \mathcal{O}(|\vec{r} + \vec{x}|)\right], \end{aligned} \tag{4.16}$$

dzięki której zapisujemy naszą całkę w zwartej postaci

$$\mathcal{Y} = \int \mathrm{d}^{3\mathcal{N}+3\mathcal{M}-6} \mathcal{R}' \mathrm{d}^3 r_0 \int \mathrm{d}^3 x \tilde{\eta}(\vec{x}) \nabla^2_{\vec{x}} K\left(\vec{\mathcal{R}}', \vec{r}_0, \vec{x}\right). \tag{4.17}$$

Przed wykonaniem całki po $\vec{x}$ rozwiniemy $K\left(\vec{\mathcal{R}}', \vec{r}_0, \vec{x}\right)$ w otoczeniu $\vec{x} = 0$. Ze względu na własność **xlii)** możemy traktować x jako dużo mniejsze niż ϵ. W związku z rozpatrywaną przez nas granicą $\epsilon \to 0$, pominiemy wszystkie człony rowinięcia zawierające ϵ podniesiony do dowolnej dodatniej potęgi. Pomijamy ponadto wyrazy rzędu x^3 i wyższe, ponieważ z własności **xli)** nie wnoszą one nic do całki $\int \mathrm{d}^3 x \tilde{\eta}(\vec{x}) \nabla^2_{\vec{x}} [\ldots]$.

Przed rozwinięciem $K\left(\vec{\mathcal{R}}', \vec{r}_0, \vec{x}\right)$ wykonamy całkowanie po $\vec{r}$

$$\begin{aligned} K\left(\vec{\mathcal{R}}', \vec{r}_0, \vec{x}\right) = 2\pi A^*\left(\vec{\mathcal{R}}', \vec{r}_0\right) A\left(\vec{\mathcal{R}}', \vec{r}_0 + \vec{x}/2\right) \int\limits_0^\epsilon r^2 \mathrm{d}r \int\limits_{-1}^1 \mathrm{d}(\cos\theta) &\left[\left(\frac{1}{r} - \frac{1}{a}\right) + \mathcal{O}(r)\right] \\ \times \left[\left(\frac{1}{\sqrt{r^2 + x^2 + 2rx\cos\theta}} - \frac{1}{a}\right) + \mathcal{O}(|\vec{r} + \vec{x}|)\right]. \end{aligned}$$

Ze względu na interesującą nas granicę $\epsilon \to 0$ opuszczamy wyrazy $\mathcal{O}(r)$ i $\mathcal{O}(|\vec{r} + \vec{x}|)$. Całkowanie najprościej wykonać najpierw po $\cos\theta$, a następnie po r

$$K\left(\vec{\mathcal{R}}',\vec{r}_0,\vec{x}\right)=A^*\left(\vec{\mathcal{R}}',\vec{r}_0\right)A\left(\vec{\mathcal{R}}',\vec{r}_0+\vec{x}/2\right)\frac{2\pi}{xa}\int\limits_0^{\epsilon}\mathrm{d}r(a-r)\left[(r+x)-\sqrt{(r-x)^2}-\frac{2rx}{a}\right].$$

Całka w powyższym wyrażeniu wynosi

$$\int\limits_0^{\epsilon}\mathrm{d}r(a-r)\left[(r+x)-\sqrt{(r-x)^2}-\frac{2rx}{a}\right]=\frac{1}{6a}\left[\sqrt{(\epsilon-x)^2}\left(2a\epsilon^2-3a^2\epsilon+3a^2x-ax\epsilon-ax^2\right)\right.$$

$$\left.+3a^2\epsilon^2-2a\epsilon^3+6a^2x\epsilon-9ax\epsilon^2+4x\epsilon^3-3a^2x^2+ax^3\right]=\left(2a\epsilon-2\epsilon^2+\frac{2\epsilon^3}{3a}\right)x-ax^2+\frac{x^3}{3}+\mathcal{O}\left(x^4\right),$$

gdzie wykonaliśmy rozwinięcie względem $x=0$. W związku z granicą $\epsilon\rightarrow 0$ pozostawiamy jedynie wyrażenia występujące przy ϵ^0. W takim razie

$$\lim_{\epsilon\rightarrow 0}K\left(\vec{\mathcal{R}}',\vec{r}_0,\vec{x}\right)=-4\pi A^*\left(\vec{\mathcal{R}}',\vec{r}_0\right)A\left(\vec{\mathcal{R}}',\vec{r}_0+\vec{x}/2\right)\left(\frac{x}{2}-\frac{x^2}{6a}\right)+\mathcal{O}\left(x^3\right).$$

Rozwijamy jeszcze $A\left(\vec{\mathcal{R}}',\vec{r}_0+\vec{x}/2\right)$ względem $x=0$

$$A\left(\vec{\mathcal{R}}',\vec{r}_0+\vec{x}/2\right)=A\left(\vec{\mathcal{R}}',\vec{r}_0\right)+\frac{x}{2}\hat{x}\cdot\nabla_{\vec{r}_0}A\left(\vec{\mathcal{R}}',\vec{r}_0\right)+\mathcal{O}\left(x^2\right).$$

Jeśli, zgodnie z wcześniej przeprowadzoną dyskusją, pominiemy wyrazy rzędu x^3 i wyższe to otrzymamy

$$\lim_{\epsilon\rightarrow 0}K\left(\vec{\mathcal{R}}',\vec{r}_0,\vec{x}\right)=-4\pi\left|A\left(\vec{\mathcal{R}}',\vec{r}_0\right)\right|^2\left(\frac{x}{2}-\frac{x^2}{6a}\right)-x^2\pi A\left(\vec{\mathcal{R}}',\vec{r}_0\right)\hat{x}\cdot\nabla_{\vec{r}_0}A\left(\vec{\mathcal{R}}',\vec{r}_0\right),\quad(4.18)$$

co po zadziałaniu laplasjanem w $\vec{x}$ daje

$$\nabla^2_{\vec{x}}\left[\lim_{\epsilon\rightarrow 0}K\left(\vec{\mathcal{R}}',\vec{r}_0,\vec{x}\right)\right]=-4\pi\left|A\left(\vec{\mathcal{R}}',\vec{r}_0\right)\right|^2\left(\frac{1}{x}-\frac{1}{a}\right)-6\pi A\left(\vec{\mathcal{R}}',\vec{r}_0\right)\hat{x}\cdot\nabla_{\vec{r}_0}A\left(\vec{\mathcal{R}}',\vec{r}_0\right).\quad(4.19)$$

Korzystając z własności **xl)** oraz **xliv)** widzimy, że w granicy $\epsilon\rightarrow 0$, całka po $\vec{x}$ występująca w wyrażeniu (4.17) jest równa 0. Wykazaliśmy zatem, że w granicy $\epsilon\rightarrow 0$ całka (4.14) po przestrzeni $\mathcal{I}(\epsilon)$ znika. Zatem faktycznie zachodzi równość

$$\mathcal{X}=E_{int}.\quad(4.20)$$

Przepiszmy teraz wyrażenie (4.14) w formaliźmie drugiej kwantyzacji - korzystając z operatorów pola fermionowego (1.46)

$$-\frac{2m}{\hbar^2}\mathcal{X}=\left\langle\phi\left|\sum_{\sigma}\int\mathrm{d}^3r\mathrm{d}^3x\widetilde{\eta}(\vec{x})\hat{\psi}^\dagger_\sigma(\vec{r})\nabla^2_{\vec{x}}\hat{\psi}_\sigma(\vec{r}+\vec{x})\right|\phi\right\rangle.\quad(4.21)$$

Stany własne operatora pędu pojedynczego fermionu to po prostu

$$\phi_k(\vec{r})=\frac{1}{\sqrt{\Omega}}\mathrm{e}^{i\vec{k}\cdot\vec{r}},\quad(4.22)$$

gdzie Ω jest objętością przestrzeni dostępnej dla fermionu. Korzystając z ortogonalności funkcji $\phi_k(\vec{r})$ oraz wyrażenia na transformatę odwrotną $\widetilde{\eta}(\vec{x})$ otrzymujemy kolejno

$$-\frac{2m}{\hbar^2}\mathcal{X}=\frac{1}{\Omega}\left\langle\phi\left|\sum_{\sigma}\sum_{\vec{k},\vec{k}'}\int\mathrm{d}^3r\mathrm{d}^3x\widetilde{\eta}(\vec{x})\nabla^2_{\vec{x}}\mathrm{e}^{i\left(\vec{k}-\vec{k}'\right)\cdot\vec{r}}\mathrm{e}^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}\sigma}\hat{a}_{\vec{k}'\sigma}\right|\phi\right\rangle=$$

$$= \left\langle \phi \middle| \sum_{\vec{k},\sigma} \int \mathrm{d}^3x \tilde{\eta}(\vec{x}) \nabla^2_{\vec{x}} \mathrm{e}^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \hat{a}^\dagger_{\vec{k}\sigma} \hat{a}_{\vec{k}\sigma} \middle| \phi \right\rangle = - \left\langle \phi \middle| \sum_{\vec{k},\sigma} \int \mathrm{d}^3x \tilde{\eta}(\vec{x}) \mathrm{e}^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} k^2 \hat{a}^\dagger_{\vec{k}\sigma} \hat{a}_{\vec{k}\sigma} \middle| \phi \right\rangle =$$

$$= - \left\langle \phi \middle| \sum_{\vec{k},\sigma} \eta(\vec{k}) k^2 \hat{a}^\dagger_{\vec{k}\sigma} \hat{a}_{\vec{k}\sigma} \middle| \phi \right\rangle = - \sum_{\vec{k},\sigma} \eta(\vec{k}) k^2 \langle \phi | \hat{a}^\dagger_{\vec{k}\sigma} \hat{a}_{\vec{k}\sigma} | \phi \rangle.$$

Biorąc jeszcze definicję $n_{\vec{k}\sigma}$ (4.1) oraz uwzględniając równość (4.20) otrzymujemy

$$E_{int} = \sum_{\vec{k},\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \eta(\vec{k}) n_{\vec{k}\sigma}. \tag{4.23}$$

W ten sposób udowodniliśmy równość (4.6) dla czystego stanu kwantowego z ustaloną liczbą fermionów w dwóch stanach spinowych ($\uparrow$,$\downarrow$).

Niech teraz układ znajduje się w stanie mieszanym, reprezentowanym przez operator gęstości $\hat{\rho}$ (4.2), przy czym dla różnych stanów czystych z $\hat{\rho}$ twierdzenie jest spełnione. Niech ponadto spełniony jest warunek 2. Wtedy również dla zespołu statystycznego tych stanów twierdzenie jest poprawne, co kończy dowód.

Zamiana sumy po dyskretnym zbiorze wektorów falowych na całkę po ciągłym zbiorze $\vec{k}$ wymaga wprowadzenia gęstości stanów $\mathcal{G}(\vec{k})$, która po nałożeniu na trójwymiarowy układ periodycznych warunków brzegowych wynosi

$$\mathcal{G}(\vec{k}) = \frac{\Omega}{(2\pi)^3}, \tag{4.24}$$

gdzie Ω, w przypadku jednorodnego gazu atomowego, jest objętością przezeń zajmowaną. Jeśli gaz jest ściśnięty to Ω jest dowolną objętością znacznie przekraczającą objętość gazu. Wykorzystując równość (4.24) możemy zapisać

$$\sum_{\vec{k}} (\ldots) = \int \mathrm{d}^3k \mathcal{G}(\vec{k}) (\ldots) = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int \mathrm{d}^3k (\ldots), \tag{4.25}$$

a zatem (4.23) możemy przepisać jako

$$E_{int} = \Omega \sum_{\sigma} \int \frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \eta(\vec{k}) n_{\vec{k}\sigma}. \tag{4.26}$$

Korzystając z własności **xlvii)**, definicji (4.1) oraz uwzględniając, w pierwszym członie, sumowanie po zbiorze spinów $\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$ dostajemy

$$E_{int} = \frac{\hbar^2 \Omega \mathcal{C}}{4\pi a m} + \lim_{\mathcal{K}\to\infty} \sum_{|\vec{k}|<\mathcal{K},\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \left(n_{\vec{k}\sigma} - \frac{\mathcal{C}}{k^4} \right). \tag{4.27}$$

4.2 Kontakt

Rozwińmy wielkość $\rho_\sigma(\vec{r}, \vec{r}+\vec{x}) = \left\langle \hat{\psi}^\dagger_\sigma(\vec{r}) \hat{\psi}_\sigma(\vec{r}+\vec{x}) \right\rangle$ względem małego $\vec{x}$ pozostawiając jedynie wyrazy pierwszego rzędu w x. W tym celu dokonajmy podziału przestrzeni na podprzestrzenie $\mathcal{I}(\epsilon)$ i $\mathcal{D}(\epsilon)$ - jak w dowodzie twierdzenia o energii

$$\left\langle \hat{\psi}^\dagger_\sigma(\vec{r})\hat{\psi}_\sigma(\vec{r}+\vec{x})\right\rangle = \lim_{\epsilon\to 0}\frac{\mathcal{N}\mathcal{M}}{\mathcal{N}!\mathcal{M}!}\int \mathrm{d}^{3\mathcal{N}+3\mathcal{M}-6}\mathcal{R}' K\left(\vec{\mathcal{R}}',\vec{r},\vec{x}\right)$$
$$+\lim_{\epsilon\to 0}\frac{\mathcal{N}\mathcal{M}}{\mathcal{N}!\mathcal{M}!}\int \mathrm{d}^{3\mathcal{N}+3\mathcal{M}-6}\mathcal{R}' \int\limits_{r>\epsilon}\mathrm{d}^3r'\phi^*\left(\vec{\mathcal{R}}',\vec{r}',\vec{r},\right)\phi\left(\vec{\mathcal{R}}',\vec{r}',\vec{r}+\vec{x}\right). \tag{4.28}$$

W powyższym wyrażeniu skorzystano z wcześniej zdefiniowanej, przez wyrażenie (4.16), wielkości $K\left(\vec{\mathcal{R}}',\vec{r}_0,\vec{x}\right)$. Korzystając z rozwinięcia wykonanego w dowodzie twierdzenia o energii (4.18) pierwsza całka jest równa

$$\int \mathrm{d}^{3\mathcal{N}+3\mathcal{M}-6}\mathcal{R}' K\left(\vec{\mathcal{R}}',\vec{r},\vec{x}\right) = -2\pi x\int \mathrm{d}^{3\mathcal{N}+3\mathcal{M}-6}\mathcal{R}'\left|A\left(\vec{\mathcal{R}}',\vec{r}\right)\right|^2+\mathcal{O}\left(x^2\right)+\mathcal{O}_{\mathcal{I}}(\epsilon). \tag{4.29}$$

W drugiej całce z wyrażenia (4.28) wykonujemy rozwinięcie do pierwszego rzędu względem małego $\vec{x}$

$$\int \mathrm{d}^{3\mathcal{N}+3\mathcal{M}-6}\mathcal{R}' \int\limits_{r>\epsilon}\mathrm{d}^3r'\phi^*\left(\vec{\mathcal{R}}',\vec{r}',\vec{r}\right)\phi\left(\vec{\mathcal{R}}',\vec{r}',\vec{r}+\vec{x}\right) = \int \mathrm{d}^{3\mathcal{N}+3\mathcal{M}-6}\mathcal{R}' \int\limits_{r>\epsilon}\mathrm{d}^3r'\left|\phi\left(\vec{\mathcal{R}}',\vec{r}',\vec{r}\right)\right|^2$$
$$+\int \mathrm{d}^{3\mathcal{N}+3\mathcal{M}-6}\mathcal{R}' \int\limits_{r>\epsilon}\mathrm{d}^3r'\phi^*\left(\vec{\mathcal{R}}',\vec{r}',\vec{r}\right)\vec{x}\cdot\nabla_{\vec{r}}\phi\left(\vec{\mathcal{R}}',\vec{r}',\vec{r},\right)+\mathcal{O}\left(x^2\right). \tag{4.30}$$

Zauważamy przy tym, że

$$\frac{\mathcal{N}\mathcal{M}}{\mathcal{N}!\mathcal{M}!}\lim_{\epsilon\to 0}\left[\int \mathrm{d}^{3\mathcal{N}+3\mathcal{M}-6}\mathcal{R}' \int\limits_{r>\epsilon}\mathrm{d}^3r'\left|\phi\left(\vec{\mathcal{R}}',\vec{r}',\vec{r}\right)\right|^2+\mathcal{O}_{\mathcal{I}}(\epsilon)\right] = \rho_\sigma(\vec{r}), \tag{4.31}$$

oraz

$$\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{\mathcal{N}\mathcal{M}}{\mathcal{N}!\mathcal{M}!}\lim_{\epsilon\to 0}\left[\int \mathrm{d}^{3\mathcal{N}+3\mathcal{M}-6}\mathcal{R}' \int\limits_{r>\epsilon}\mathrm{d}^3r'\phi^*\left(\vec{\mathcal{R}}',\vec{r}',\vec{r}\right)\vec{x}\cdot\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla_{\vec{r}}\,\phi\left(\vec{\mathcal{R}}',\vec{r}',\vec{r}\right)\right] = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\vec{x}\cdot\vec{p}_\sigma(\vec{r}). \tag{4.32}$$

Zdefiniujmy ponadto wielkość

$$\mathfrak{C}(\vec{r}) = \frac{16\pi^2}{(\mathcal{N}-1)!(\mathcal{M}-1)!}\int \mathrm{d}^{3\mathcal{N}+3\mathcal{M}-6}\mathcal{R}'\left|A\left(\vec{\mathcal{R}}',\vec{r}\right)\right|^2. \tag{4.33}$$

Korzystając z równości (4.28) - (4.33) otrzymujemy ostatecznie

$$\left\langle \hat{\psi}^\dagger_\sigma(\vec{r})\hat{\psi}_\sigma(\vec{r}+\vec{x})\right\rangle = \rho_\sigma(\vec{r})-\frac{\mathfrak{C}(\vec{r})x}{8\pi}+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\vec{x}\cdot\vec{p}_\sigma(\vec{r})+\mathcal{O}\left(x^2\right). \tag{4.34}$$

Wielkość $n_{\vec{k}\sigma}$ dla $\vec{k}\to\infty$ wyznaczamy w następujący sposób

$$n_{\vec{k}\sigma} = \int \mathrm{d}^3r\mathrm{d}^3x\left\langle \hat{\psi}^\dagger_\sigma(\vec{r})\hat{\psi}_\sigma(\vec{r}+\vec{x})\right\rangle \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{x}} = \int \mathrm{d}^3r\mathrm{d}^3x\rho_\sigma(\vec{r})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{x}}-\frac{1}{8\pi}\int \mathrm{d}^3r\mathrm{d}^3x\mathfrak{C}(\vec{r})x\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{x}}$$
$$+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int \mathrm{d}^3r\mathrm{d}^3x\vec{x}\cdot\vec{p}_\sigma(\vec{r})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{x}}+\int \mathrm{d}^3r\mathrm{d}^3x\mathcal{O}\left(x^2\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{x}}, \tag{4.35}$$

gdzie kolejne całki wynoszą odpowiednio

$$\int \mathrm{d}^3r\mathrm{d}^3x\rho_\sigma(\vec{r})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{x}} = (2\pi)^3\delta(\vec{k})\int \mathrm{d}^3r\rho_\sigma(\vec{r}),$$

$$\int \mathrm{d}^3r\mathrm{d}^3x\mathfrak{C}(\vec{r})x\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{x}} = 2\pi\int \mathrm{d}^3r\mathfrak{C}(\vec{r})\frac{\mathrm{d}^3}{\mathrm{d}(\mathrm{i}k)^3}\int\limits_{-1}^{1}\mathrm{d}(\cos\theta)\int\limits_0^\infty \mathrm{d}x\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx\cos\theta} = -\frac{8\pi}{k^4}\int \mathrm{d}^3r\mathfrak{C}(\vec{r}),$$

$$\int \mathrm{d}^3r\mathrm{d}^3x\vec{x}\cdot\vec{p}_\sigma(\vec{r})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{x}} = \int \mathrm{d}^3r\mathrm{d}^3x\vec{p}_\sigma(\vec{r})\cdot\nabla_{\vec{k}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{x}} = 8\pi^3\int \mathrm{d}^3r\vec{p}_\sigma(\vec{r})\cdot\nabla_{\vec{k}}\,\delta(\vec{k}),$$

$$\int \mathrm{d}^3r\mathrm{d}^3x\mathcal{O}\left(x^2\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{x}} = \mathcal{O}\left(k^{-5}\right).$$

Biorąc pod uwagę wyrażenie (4.35) oraz powyższe równości otrzymujemy

$$n_{\vec{k}\sigma} \xrightarrow{\vec{k}\to\infty} \frac{\mathcal{C}}{k^4}, \tag{4.36}$$

gdzie

$$\mathcal{C} = \frac{1}{\Omega}\int \mathrm{d}^3r\mathfrak{C}(\vec{r}), \tag{4.37}$$

to tak zwany ***kontakt***. Należy zwrócić uwagę na to, że w granicy dużych $\vec{k}$, rozkład pędów $n_{\vec{k}\sigma}$ jest niezależny od σ. Wielkość $\mathfrak{C}(\vec{r})$ nazywana jest zwyczajowo ***gęstością kontaktu***.

4.3 Konsekwencje fizyczne

Wielkość $n_{\vec{k}\sigma}$ można zmierzyć eksperymentalnie doprowadzając do nagłego „wyłączenia" oddziaływań pomiędzy fermionami oraz potencjału pułapkującego. Podczas rozprężania gazu cząstki posiadające różne $\vec{k}$ poruszają się z różnymi prędkościami, co pozwala na wyznaczenie rozkładu pędów z rozkładu gęstości [12].

Znajac $n_{\vec{k}\sigma}$ możemy wyznaczyć cząstkową energię kinetyczną wykonując sumę

$$\mathcal{T}(\mathcal{K}) \equiv \sum_{|\vec{k}|<\mathcal{K},\sigma} \frac{\hbar^2k^2}{2m}n_{\vec{k}\sigma}. \tag{4.38}$$

Ze względu na zachowanie $n_{\vec{k}\sigma} = \mathcal{C}/k^4$, $\mathcal{C} > 0$ dla dużych $|\vec{k}|$, powyższa suma jest rozbieżna (zamiana sumy na całkę, w tym przypadku, da funkcję liniową). W rzeczywistych układach nie występują oddziaływania kontaktowe zatem rozbieżności nie pojawiają się przez obcięcie w $\mathcal{K} \sim 1/r_0$, gdzie r_0 jest zasięgiem oddziaływania.

Korzystając z (4.38) równanie (4.27) możemy zapisać w postaci

$$E_{int} = \frac{\hbar^2\Omega\mathcal{C}}{4\pi am} + \lim_{\mathcal{K}\to\infty}\left(\mathcal{T}(\mathcal{K}) - \sum_{|\vec{k}|<\mathcal{K},\sigma}\frac{\hbar^2\mathcal{C}}{2mk^2}\right). \tag{4.39}$$

W przypadku $\mathcal{K} \ll 1/r_0$, ale dużo większego niż inne występujące w rozważanym problemie wielkości o tym wymiarze, wyrażenie (4.39) sprowadza się do równości

$$E_{int} = \frac{\hbar^2\Omega\mathcal{C}}{4\pi am} + \mathcal{T}(\mathcal{K}) - \sum_{|\vec{k}|<\mathcal{K},\sigma}\frac{\hbar^2\mathcal{C}}{2mk^2} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\mathcal{K}}\right). \tag{4.40}$$

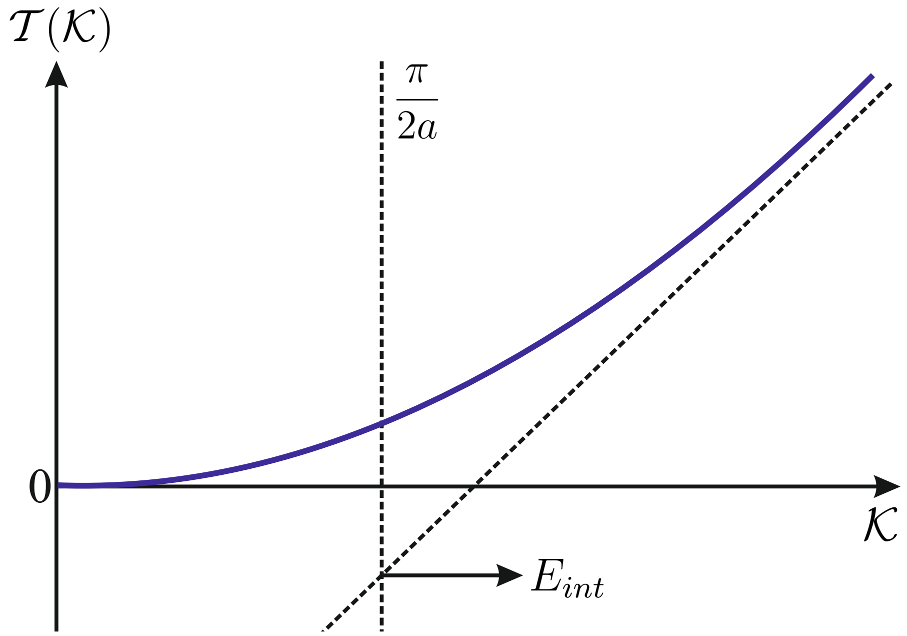
Sumę z (4.40) zamieniamy na całkę

$$\sum_{|\vec{k}|<\mathcal{K},\sigma}\frac{\hbar^2\mathcal{C}}{2mk^2} = \sum_\sigma \frac{4\pi\Omega}{(2\pi)^3}\int_0^{\mathcal{K}}\frac{\hbar^2\mathcal{C}}{2m}\mathrm{d}k = \frac{\Omega\hbar^2\mathcal{C}}{2\pi^2m}\mathcal{K}.$$

Zatem energię kinetyczną dla dużych $\mathcal{K}$, ale dużo mniejszych niż $1/r_0$, możemy przedstawić jako

$$\mathcal{T}(\mathcal{K}) = E_{int} + \frac{\Omega\hbar^2\mathcal{C}}{2\pi^2m}\left(\mathcal{K} - \frac{\pi}{2a}\right) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\mathcal{K}}\right). \tag{4.41}$$

Widzimy stąd, że $\mathcal{T}(\mathcal{K})$ dla $\mathcal{K} \ll 1/r_0$, zbiega do prostej o dodatnim współczynniku kierunkowym.



Wykres 2. Cząstkowa energia kinetyczna $\mathcal{T}(\mathcal{K})$.

Zauważamy, że podstawiając w wyrażeniu (4.41) $\mathcal{K} = \pi/2a$ otrzymamy E_{int}, co pozwala na eksperymentalne wyznaczenie tej wielkości.

Wyrażenie $\mathcal{O}(1/\mathcal{K})$ odpowiada osobliwości drugiego rzędu ($\sim r$) funkcji falowej ruchu względnego dwóch fermionów z przeciwnymi spinami (1.34) - osobliwość pierwszego rzędu to zachowane $\sim 1/r$.

Zależność $\mathcal{T}(\mathcal{K})$ dla $\mathcal{K} \to 1/r_0$ przestanie zachowywać się zgodnie z (4.41) i ostatecznie ulegnie wypłaszczeniu osiągając wartość, dużo większej niż E_{int}, całkowitej energii kinetycznej.

Podsumowanie

W pracy zaprezentowano główną ideę wprowadzenia dystrybucji $\Lambda(\vec{k})$ i $L(\vec{k})$. Szczegółowe wyprowadzenia i dogłębna analiza powinny ułatwić czytelnikowi zrozumienie wysoce nietrywialnych własności tych dystrybucji oraz ich transformat Fouriera $\lambda(\vec{r})$, $l(\vec{r})$. Celem tej analizy było zdefiniowanie tak zwanych selektorów krótkiego zasięgu (patrz punkt 3.2) i wprowadzenie selektora $\eta(\vec{k})$ (patrz punkt 3.3). Jego transformata Fouriera $\widetilde{\eta}(\vec{r})$, jak pokazano, anihiluje funkcję falową dla oddziaływania kontaktowego (1.34), co okazuje się kluczowe podczas dowodzenia twierdzenia o energii (patrz punkt 4.1). Z jej pomocą definiujemy wielkość $\mathcal{X}$ (4.14), która, jak wyprowadzono wykorzystując własności $\widetilde{\eta}(\vec{r})$, jest równa energii wewnętrznej E_{int}. Korzystając z transformaty odwrotnej i zapisu wielkości E_{int} w formaliźmie drugiej kwantyzacji, otrzymujemy szukane wyrażenie na energię wewnętrzną układu kontaktowo oddziałujących fermionów. Wyrażenie to zawiera, kluczowy w całym twierdzeniu, selektor $\eta(\vec{k})$.

Wykorzystując dyskusję dotyczącą podziału przestrzeni konfiguracyjnej na podprzestrzenie $\mathcal{D}(\epsilon)$ i $\mathcal{I}(\epsilon)$ oraz, wykonane podczas dowodu twierdzenia o energii, rozwinięcie wielkości $K\left(\vec{\mathcal{R}}', \vec{r}_0, \vec{x}\right)$ (4.16), wyprowadzono tak zwany „kontakt" $\mathcal{C}$ (4.37), a także zdefiniowano jego gęstość $\mathfrak{C}(\vec{r})$. Pokazano przy tym, że kontakt $\mathcal{C}$ jest niezależny od spinu σ. Rozważania te doprowadziły nas do znalezienia asymptotycznego zachowania rozkładu pędów (4.36).

W punkcie 4.3 zaprezentowano jedną z ważniejszych konsekwencji fizycznych twierdzenia o energii, dzięki której można eksperymentalnie wyznaczać energię wewnętrzną układów fermionowych.

Zasadnicza część rozważań została poprzedzona wprowadzeniem teoretycznym 1, które, choć krótkie, jest dla czytelnika posiadającego podstawową wiedzę z zakresu analizy matematycznej, algebry oraz mechaniki kwantowej, w pełni wystarczające do pełnego zrozumienia problematyki poruszanej w pracy.

Podejście zaproponowane przez Shina Tana zaowocowało wyprowadzeniem jeszcze innych, bardzo interesujących relacji, które w ciągu ostatnich lat zostały potwierdzone eksperymentalnie. Idea wprowadzenia nowych dystrybucji okazuje się obecnie również przydatna w przypadku układów bozonowych.

Dodatki

A. Funkcja Greena dla równania Helmholtza

Weźmy trójwymiarowe równanie Helmholtza

$$\left(\nabla_{\vec{r}}^2 + k^2\right) G(\vec{r}) = \delta(\vec{r}), \tag{4.42}$$

i obliczmy jego transformatę Fouriera

$$\int \mathrm{d}^3 r \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{q}\cdot\vec{r}} \left(\nabla_{\vec{r}}^2 + k^2\right) G(\vec{r}) = 1. \tag{4.43}$$

Zadziałajmy operatorem $\nabla_{\vec{r}}^2$, który jest operatorem hermitowskim, w lewo

$$\int \mathrm{d}^3 r \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{q}\cdot\vec{r}} G(\vec{r} - \vec{r}\,') = \frac{1}{k^2 - q^2},$$

skąd

$$\widetilde{G}(\vec{q}) = \frac{1}{k^2 - q^2}. \tag{4.44}$$

Otrzymana funkcja Greena w przestrzeni pędów ma osobliwość w $q^2 = k^2$. W celu regularyzacji definiujemy funkcję

$$\widetilde{G}_\varepsilon(\vec{q}) = \frac{1}{k^2 + \mathrm{i}\varepsilon - q^2}. \tag{4.45}$$

Funkcja Greena (z indeksem ε) w przestrzeni położeń jest po prostu odwrotną transformatą Fouriera

$$\begin{aligned} G_\varepsilon(\vec{r}) &= \int \frac{\mathrm{d}^3 q}{(2\pi)^3} \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{q}\cdot\vec{r}}}{k^2 + \mathrm{i}\varepsilon - q^2} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-1}^{1} \mathrm{d}(\cos\theta) \int_0^\infty \frac{q^2 \mathrm{e}^{\mathrm{i}qr\cos\theta} \mathrm{d}q}{k^2 + \mathrm{i}\varepsilon - q^2} = \\ &= \frac{-\mathrm{i}}{(2\pi)^2 r} \int_0^\infty \frac{q\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}qr} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}qr}\right)\mathrm{d}q}{k^2 + \mathrm{i}\varepsilon - q^2} = \frac{-\mathrm{i}}{(2\pi)^2 r} \int_{-\infty}^\infty \frac{q\mathrm{e}^{\mathrm{i}qr}\mathrm{d}q}{k^2 + \mathrm{i}\varepsilon - q^2}. \end{aligned} \tag{4.46}$$

Funkcja podcałkowa ma bieguny w q spełniających równość $k^2 + \mathrm{i}\varepsilon - q^2 = 0$. Zakładając małe ε możemy przepisać to równanie jako

$$k^2 + \mathrm{i}\varepsilon - q^2 = (k + q + \mathrm{i}\kappa)(k - q + \mathrm{i}\kappa) + \mathcal{O}\left(\varepsilon^2\right) = 0, \quad \kappa = \frac{\varepsilon}{2k}, \tag{4.47}$$

i pominąć wyrazy $\mathcal{O}\left(\varepsilon^2\right)$. Powyższą całkę możemy policzyć metodą residuów. Musimy tutaj rozważyć dwa przypadki $\varepsilon > 0$ i $\varepsilon < 0$, dla których po przejściu granicznym $\varepsilon \to 0$ otrzymujemy odpowiednio

$$G(\vec{r}) = \lim_{\varepsilon \to 0^\pm} G_\varepsilon(\vec{r}) = \begin{cases} -\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{4\pi r}, & \varepsilon > 0 \\ -\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{4\pi r}, & \varepsilon < 0 \end{cases}. \tag{4.48}$$

W przypadku $\varepsilon < 0$ otrzymujemy falę kulistą schodzącą się do $r = 0$, z kolei dla $\varepsilon > 0$ mamy falę kulistą rozchodzącą się z $r = 0$. Analiza problemu rozpraszania (patrz 1.1) wymaga wybrania funkcji Greena w postaci fali rozchodzącej się z centrum - przypadek $\varepsilon > 0$.

B. Wyprowadzone własności

i) $\delta(\vec{r})\frac{\partial}{\partial r}\left(r e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\right) \equiv \delta(\vec{r})\Lambda(\vec{k})$,

ii) $\Lambda(\vec{k}) = 1, \quad k < \infty$,

iii) $\int d^3k \frac{\Lambda(\vec{k})}{k^2} = 0$,

iv) $\Lambda(\vec{k}) = \Lambda(-\vec{k})$,

v) $\Lambda^*(\vec{k}) = \Lambda(\vec{k})$,

vi) $\Lambda(\xi\vec{k} - \vec{k}_0) = \Lambda(\vec{k}), \quad \xi \neq 0, \quad \xi \in \mathbb{R}, \quad |\vec{k}_0| < \infty$,

vii) $\int d^3k \frac{\Lambda(\vec{k})}{(\vec{k} - \vec{k}_0)^2 + \alpha^2} = -2\pi^2|\alpha|, \quad \alpha \in \mathbb{R}$, $|\vec{k}_0| < \infty$,

viii) $\lambda(\xi\vec{r}) = |\xi|^{-3}\lambda(\vec{r}), \quad \xi \neq 0, \quad \xi \in \mathbb{R}$,

ix) $\lambda(\vec{r}) = \lambda(-\vec{r})$,

x) $\lambda^*(\vec{r}) = \lambda(\vec{r})$,

xi) $\int d^3r \frac{\lambda(\vec{r})}{r} e^{-i\vec{k}_0\cdot\vec{r}} = 0, \quad |\vec{k}_0| < \infty$,

xii) $\int d^3r \frac{\lambda(\vec{r})}{r} = 0, \quad \int d^3r \lambda(\vec{r})\hat{r} = 0$,

xiii) $\int d^3r \lambda(\vec{r})\phi(\vec{r}) = \phi(0)$,

xiv) $\lambda(\vec{r}) = 0, \quad \vec{r} \neq 0$,

xv) $\int d^3r \lambda(\vec{r}) = 1$,

xvi) $\int d^3\lambda(\vec{r}) \frac{\chi(\vec{r})}{r} = 0$,

xvii) $L(\vec{k}) = 0, \quad k < \infty$,

xviii) $\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{L(\vec{k})}{k^2} = 1$,

xix) $\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} L(\vec{k})\widetilde{f}(\vec{k}) = \lim_{\vec{k}\to\infty} k^2\widetilde{f}(\vec{k})$,

xx) $L(\xi\vec{k}) = |\xi|^{-1}L(\vec{k}), \quad \xi \neq 0, \quad \xi \in \mathbb{R}$,

xxi) $L^*(\vec{k}) = L(\vec{k})$,

xxii) $L(\vec{k} - \vec{k}_0) = L(\vec{k})$,

xxiii) $\int d^3r \frac{l(\vec{r})}{r} = 4\pi$,

xxiv) $\int d^3r\, l(\vec{r})f(\vec{r}) = \lim_{\vec{r}\to 0} 4\pi r f(\vec{r})$,

xxv) $l(\vec{r}) = 0, \quad \vec{r} \neq 0$,

xxvi) $\int d^3r\, l(\vec{r}) = 0$,

xxvii) $l^*(\vec{r}) = l(-\vec{r}) = l(\vec{r})$,

xxviii) $l(\xi\vec{r}) = |\xi|^{-2}l(\vec{r}), \quad \xi \neq 0, \quad \xi \in \mathbb{R}$,

xxix) $\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} f_1(\vec{k}) = 1$,

xxx) $f_2(\vec{k}) = \frac{1}{k^2} + r'(\vec{k}), \quad \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} r'(\vec{k}) = 0$,

xxxi) $s_1(\vec{k}) = \Lambda(\vec{k}), \quad s_2(\vec{k}) = L(\vec{k})$,

xxxii) $\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} s_i^*(\vec{k})f_j(\vec{k}) = \delta_{ij}$,

xxxiii) $\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} s_j^*(\vec{k})f(\vec{k}) = c_j, \quad f(\vec{k}) = \sum_{i=1}^{2} c_i f_i(\vec{k})$,

xxxiv) $\int d^3r\, \widetilde{s}_i^*(\vec{r})\widetilde{f}_j(\vec{r}) = \delta_{ij}, \quad \widetilde{f}_i(\vec{r}) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} f_i(\vec{k})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$, $\widetilde{s}_i(\vec{r}) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} s_i(\vec{k})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$,

xxxv) $\int d^3r \lambda(\vec{r}) = 1, \quad \int d^3r \frac{\lambda(\vec{r})}{4\pi r} = 0$,

xxxvi) $\int d^3r\, l(\vec{r}) = 0, \quad \int d^3r \frac{l(\vec{r})}{4\pi r} = 1$,

xxxvii) $\widetilde{s}_i(\vec{r}) = 0, \quad \vec{r} \neq 0$,

xxxviii) $\eta(\vec{k}) \equiv \Lambda(\vec{k}) + \frac{L(\vec{k})}{4\pi a}$,

xxxix) $\widetilde{\eta}(\vec{r}) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \eta(\vec{k})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \lambda(\vec{r}) + \frac{l(\vec{r})}{4\pi a}$,

xl) $\int d^3r\, \widetilde{\eta}(\vec{r})\psi_s(\vec{r}) = \int d^3r\, \widetilde{\eta}(\vec{r}) \left[B_0(t)\left(\frac{1}{r} - \frac{1}{a}\right) + \mathcal{O}(r)\right] = 0$,

xli) $\int d^3r\, \widetilde{\eta}(\vec{r})f(\vec{r}) = f(0)$,

xlii) $\widetilde{\eta}(\vec{r}) = 0, \quad \vec{r} \neq 0$,

xliii) $\widetilde{\eta}^*(\vec{r}) = \widetilde{\eta}(\vec{r}) = \widetilde{\eta}(-\vec{r})$,

xliv) $\int d^3r\, \widetilde{\eta}(\vec{r})\hat{r} = 0$,

xlv) $\eta(\vec{k}) = 1, \quad k < \infty$,

xlvi) $\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\eta(\vec{k})}{k^2} = \frac{1}{4\pi a}$,

xlvii) $\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \eta(\vec{k})f(\vec{k}) = \frac{\gamma}{4\pi a} + \lim_{\mathcal{K}\to\infty} \int_{k<\mathcal{K}} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left[f(\vec{k}) - \frac{\gamma}{k^2}\right]$, $\gamma = \lim_{\vec{k}\to\infty} k^2 f(\vec{k})$.

Bibliografia

[1] S. Tan, *S-wave contact interaction problem: a simple description*, arXiv:cond-mat/0505615.

[2] S. Tan, *Energetics of a strongly correlated Fermi gas*, Annals of Physics, 2008, vol. 323, s. 2952-2970.

[3] E. Braaten, *Universal Relations for Fermions with Large Scattering Length*, Lecture Notes in Physics, 2012, vol. 836, s. 193-231.

[4] J. T. Stewart, J. P. Gaebler, T. E. Drake, D. S. Jin, *Verification of universal relations in a strongly interacting Fermi gas*, Physical Review Letters, 2010, vol. 104, 235301.

[5] R. J. Wild, P. Makotyn, J. M. Pino, E. A. Cornell, D. S. Jin, *Measurements of Tan's Contact in an Atomic Bose-Einstein Condensate*, Physical Review Letters, 2012, vol. 108, 145305.

[6] A. Messiah, *Quantum Mechanics*, North-Holland Publishing Company, Amsterdam 1961.

[7] K. Sacha, *Kondensat Bosego-Einsteina*, Wydawnictwo Instytutu Fizyki im. M. Smoluchowskiego, Kraków 2004.

[8] R. Shankar, *Mechanika kwantowa*, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 2007.

[9] J. D. Jackson, *Elektrodynamika klasyczna*, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 1982.

[10] R. Mehrem, *The Plane Wave Expansion, Infinite Integrals and Identities involving Spherical Bessel Functions*, arXiv:0909.0494.

[11] C. Cohen-Tannoudji, *Atom-Atom Interactions in Ultracold Quantum Gases*, Lectures on Quantum Gases Institut Henri Poincaré, Paris, 25 April 2007, cel-00346023.

[12] M. Greiner, C. A. Regal, J. T. Stewart, D. S. Jin, *Probing pair-correlated fermionic atoms through correlations in atom shot noise*, Physical Review Letters, 2005, vol. 94, 110401.