

ПРАВИТЕЛЬСТВО РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
"САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ"
(СПбГУ)

КАФЕДРА СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ



Профиль бозе-конденсата в трёхмерных системах в ловушках

Дипломная работа
студента

_____ Поткиной Марии Николаевны

Научный руководитель:
_____ д. ф.-м. н., профессор **Налимов М.Ю.**

Рецензент:
_____ аспирант **Батькович Д.В.**

Санкт-Петербург
2015

Содержание

Введение	3
1 Вывод уравнения на профиль	5
2 Уравнение на профиль конденсата в беспетлевом приближении	10
3 Решение уравнения на профиль	11
3.1 Ортонормированная система функций	11
3.2 Построение теории возмущений	13
4 Функция Грина	15
5 Среднее число частиц в системе	17
6 Теория возмущений	20
7 Заключение	21
Литература	22
A Собственные значения оператора $-\Delta - \mu + r^2 + \frac{g}{4}\alpha^2$	23
B Собственные функции оператора $-\Delta - \mu + r^2 + \frac{g}{4}\alpha^2$	23

Введение

В данной работе исследуется трёхмерная система, представляющая собой бозе-газ в магнитной ловушке в окрестности точки фазового перехода. Магнитная ловушкой называется пространственная конфигурация магнитного поля для ограничения движения каких-либо объектов. Принцип удержания основан на взаимодействии заряженных частиц с магнитным полем. Энергия частицы с собственным магнитным моментом \vec{m} в поле магнитной индукции \vec{B} равна $-(\vec{m} \cdot \vec{B})$. Полная энергия частицы $E_0 = E_{kin} - (\vec{m} \cdot \vec{B})$ при движении в ловушке сохраняется. Таким образом, для удержания частиц с магнитным моментом, сонаправленным с полем, необходим локальный минимум поля \vec{B} вблизи центра ловушки. [5] В данной работе рассматривается ловушка с гармоническим потенциалом $V(x, y, z) = \omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2$, где $\omega_x, \omega_y, \omega_z$ -частоты ловушки соответственно в x -, y -, z - направлениях.

Динамику разреженного бозе-газа во внешнем потенциале $V(\vec{r})$ описывает нелинейное уравнение Шрёдингера вида:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = (-\hbar^2 \frac{\Delta}{2m} + V(\vec{r}) + g|\Psi(\vec{r}, t)|^2) \Psi(\vec{r}, t),$$

где $g = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}$, a -амплитуда s -рассеяния медленных атомов друг на друге в борновском приближении.

Это уравнение было получено в 1961г. независимо Е.П.Гроссом и Л.П.Питаевским. [3]

Для газа, находящегося в основном состоянии, оно было приведено посредством представления $\Psi(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r})e^{-\frac{i\mu t}{\hbar}}$ к следующему виду:

$$(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) - \mu + g|\Psi(\vec{r})|^2) \Psi(\vec{r}) = 0$$

В работе [4] было получено приближенное аналитическое решение уравнения Гросса-Питаевского для двумерной системы в гармоническом потенциале.

Целью данной работы является попытка обнаружения фазового перехода в бозе-газе в трёхмерной магнитной ловушке. Вывод уравнение на профиль конденсата производится с помощью представления статистической суммы и плотности системы через функциональные интегралы по бозонным полям с использованием первого преобразования Лежандра.

Предлагается способ построения решения полученного уравнения по теории возмущений. Далее производится построение пропагатора исследуемой системы через найденное решение, находится среднее число частиц и анализируется полученное выражения на аналитичность при стремлении малого параметра теории возмущений к нулю.

1 Вывод уравнения на профиль

В формализме температурных функций Грина статистическая сумма, равная следу статистического оператора, определяется выражением [2]:

$$\Sigma = C \int D[\psi]D[\psi^+]e^{-S_\beta(\psi,\psi^+)} \quad (1)$$

где $S_\beta(\psi, \psi^+)$ — температурное действие:

$$S_\beta = \int_0^\beta d\tau \int dx \psi^+(x) (\partial_\tau - \frac{\Delta}{2m} - \mu) \psi(x) + \\ + \int_0^\beta d\tau \int dx \int dx' \psi^+(x, \tau) \psi(x, \tau) V(x - x') \psi^+(x', \tau) \psi(x', \tau)$$

Согласно гипотезе Ландау для описания фазовых переходов достаточно взять потенциал взаимодействия в виде: $V(x - x') = g\delta(x - x')/2$, $g > 0$, что моделирует отталкивание частиц на близких расстояниях.

$$S_\beta = \int_0^\beta d\tau \int dx (\psi^+(x) (\partial_\tau - \frac{\Delta}{2m} - \mu) \psi(x) + \frac{g}{2} \psi^+(x) \psi(x) \psi^+(x) \psi(x))$$

Для того, чтобы это выражение соответствовало статистическому оператору, необходимо наложить дополнительное условие на поле ψ : интегрирование в (1) ведется в функциональном пространстве по функциям периодическим по времени:

$$\psi(\vec{x}, \tau = 0) = \psi(\vec{x}, \tau = \beta)$$

Также потребуем: $\psi^+(\vec{x}, \tau) = \psi^+(\vec{x}, -\tau)$.

Большой термодинамический потенциал и статистическая сумма связаны соотношением

$$\Omega = -kT \ln \Sigma = -kT (\ln C + \ln \int D[\psi]D[\psi^+]e^{-S_\beta(\psi,\psi^+)})$$

Отсюда мы можем получить среднюю плотность числа частиц:

$$n = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{T,V} = \frac{kT}{V} \frac{\int D[\psi]D[\psi^+] \int dx d\tau \psi^+ \psi e^{-S_\beta(\psi,\psi^+)}}{\int D[\psi]D[\psi^+] e^{-S_\beta(\psi,\psi^+)}} = \frac{kT}{V} \int dx d\tau \langle \psi^+(x) \psi(x) \rangle \quad (2)$$

Здесь предположено, что константа C не зависит от β и μ , однако это не так. Нормировочная константа C содержит в себе некоторый функциональный детерминант линейного дифференциального оператора. Как правило, такие детерминанты неопределены и

нуждаются в доопределении. Можно показать, что существует такая регуляризация этих детерминантов, что вклад C в плотность исчезает.[1]

Производящий функционал полных функций Грина задается следующим равенством:

$$\mathcal{G}(A, A^+) = C \int D[\psi]D[\psi^+] e^{\psi^+(-\partial_\tau + \frac{\Delta}{2m} + \mu)\psi - \frac{g}{2}(\psi\psi^+)^2 + \psi^+ A + A^+ \psi} \quad (3)$$

Для получения производящих свойств здесь введены фиктивные внешние поля A и A^+ , которые в нашей системе равны нулю. Далее определим производящий функционал связанных корреляционных функций Грина:

$$W(A, A^+) = \ln \mathcal{G}(A, A^+) \quad (4)$$

Уравнение Швингера

$$\int D[\psi]D[\psi^+] \frac{\delta}{\delta\psi^+} e^{-S + \psi^+ A + A^+ \psi} = 0 \quad (5)$$

после взятия производной по ψ^+ примет вид:

$$\int D[\psi]D[\psi^+] e^{-S + \psi^+ A + A^+ \psi} \left(-\frac{\delta S}{\delta\psi^+} + A \right) = 0 \quad (6)$$

Совершим преобразование Лежандра: перейдём от $W(A, A^+)$ к $\Gamma(\alpha, \alpha^+) = W(A, A^+) - A^+ \alpha - A \alpha^+$ (интегрирование по x переменным опущено), где

$$\alpha(x) = \frac{\delta W}{\delta A^+(x)}$$

$$\alpha^+(x) = \frac{\delta W}{\delta A(x)}.$$

Γ называют производящим функционалом 1-частичных неприводимых функций Грина. С другой стороны непосредственно проверяется, что дифференцирование по α и α^+ функционала Γ даёт следующие два равенства, называемые уравнения стационарности:

$$A(x) = -\frac{\delta \Gamma}{\delta \alpha^+(x)}$$

$$A^+(x) = -\frac{\delta \Gamma}{\delta \alpha(x)} \quad (7)$$

Так как в исходной задаче внешних полей A, A^+ не было, то левая часть уравнений равна нулю.

Для матриц Гессе функционалов $W(A, A^+)$ и $\Gamma(\alpha, \alpha^+)$:

$$W_2 = W_2(A, A^+) = \begin{pmatrix} \frac{\delta^2 W}{\delta A \delta A} & \frac{\delta^2 W}{\delta A \delta A^+} \\ \frac{\delta^2 W}{\delta A^+ \delta A} & \frac{\delta^2 W}{\delta A^+ \delta A^+} \end{pmatrix}$$

$$\Gamma_2 = \Gamma_2(\alpha, \alpha^+) = \begin{pmatrix} \frac{\delta^2 \Gamma}{\delta \alpha \delta \alpha} & \frac{\delta^2 \Gamma}{\delta \alpha \delta \alpha^+} \\ \frac{\delta^2 \Gamma}{\delta \alpha^+ \delta \alpha} & \frac{\delta^2 \Gamma}{\delta \alpha^+ \delta \alpha^+} \end{pmatrix}$$

имеет место соотношение:

$$W_2 \Gamma_2 = -I \quad (8)$$

Кроме того, производная $W(A, A^+)$ по любой переменной кроме A, A^+, α, α^+ совпадает с производной $\Gamma(\alpha, \alpha^+)$ по той же переменной [1]. $W(A, A^+) |_{A, A^+ = 0} = -\beta \Omega$

Это позволяет записать уравнение состояния (2) в терминах функционала Γ :

$$n = \frac{1}{\beta V} \left(\frac{\partial W}{\partial \mu} \right)_{\beta = const, A, A^+ = 0} = \frac{1}{\beta V} \left(\frac{\partial \Gamma}{\partial \mu} \right)_{\beta = const, A, A^+ = 0} \quad (9)$$

Известно, что функционал Γ можно найти с помощью теории возмущений по числу петель, при этом ведущий вклад (беспетлевое приближение) определяется действием теории с заменой ψ^+, ψ на α^+, α [1]. В модели (3) имеем:

$$\Gamma(\alpha^+, \alpha) = \Gamma_0 + \alpha^+ (-\partial_\tau + \frac{\Delta}{2m} + \mu) \alpha - \frac{g}{2} (\alpha^+ \alpha)^2 + \dots$$

Здесь Γ_0 -связанный с константой C вклад независящих от α^+, α членов, многоточием обозначен вклад петлевых диаграмм.

Выражение (9) примет вид:

$$n = \frac{1}{V\beta} \left(\frac{\partial \Gamma_0}{\partial \mu} \right)_T + |\alpha|^2$$

Первое слагаемое называют нормальным вкладом в плотность, второе-плотностью конденсата, α -профилем конденсата.

Будем называть пропагатором $W_2 = -(\Gamma_2)^{-1}$.

Обозначим $\frac{\delta^2 W}{\delta A(x_1) \delta A(x_2)} = \text{---}$, $\frac{\delta^2 W}{\delta A(x_1) \delta A^+(x_2)} = \text{---}$

$$\mathcal{G}(A, A^+) = e^{W(A, A^+)} = \int D[\psi] D[\psi^+] e^{\psi^+ (-\partial_\tau + \frac{\Delta}{2m} + \mu) \psi - \frac{g}{2} (\psi \psi^+)^2 + \psi^+ A + A^+ \psi}$$

Уравнение Швингера может быть записано в виде:

$$\left(K \frac{\delta}{\delta A^+} + g \frac{\delta^2}{\delta A^{+2}} \frac{\delta}{\delta A} - A \right) e^{W(A, A^+)} = 0 \quad (10)$$

Где оператор $K = \partial_\tau - \frac{\Delta}{2m} - \mu$.

Хотим записать это выражение в терминах функционала Γ и новых полей α и α^+ .

$$\frac{\delta}{\delta A^+} e^{W(A, A^+)} = e^W \frac{\delta W}{\delta A^+} = e^W \alpha$$

$$\frac{\delta^2}{\delta A^{+2}} \frac{\delta}{\delta A} e^{W(A, A^+)} = \left(\frac{\delta^3 W}{\delta A \delta^2 A^+} + 2 \frac{\delta^2 W}{\delta A \delta A^+} \frac{\delta W}{\delta A^+} + \frac{\delta^2 W}{\delta A^{+2}} \frac{\delta W}{\delta A} + \frac{\delta W}{\delta A} \frac{\delta W}{\delta A^+} \frac{\delta W}{\delta A^+} \right) e^{W(A, A^+)}$$

Второй и третий вклады содержат элементы матрицы W_2 . Четвертый равен $\alpha \alpha \alpha^+$.

Введем следующие обозначения:

$$\frac{\delta^2 W}{\delta A^{+2}} = \text{loop}, \quad \frac{\delta^2 W}{\delta A^+ \delta A} = \text{loop with star}$$

Для первого слагаемого можно продифференцировать тождество 8 и переписать его в терминах Γ_2 и Γ_3 .

$$\frac{\delta^3 W}{\delta A \delta^2 A^+} = \text{loop with star and dot}$$

Окончательно получаем следующее уравнение на α :

$$K\alpha + g\alpha\alpha^+\alpha + g \text{loop} \alpha^+ + 2g \text{loop with star} \alpha + g \text{loop with star and dot} = -\Gamma_1 = 0 \quad (11)$$

Аналогичным образом получаются уравнения на Γ_k для $k = 2, 3, \dots$. Легко видеть, что это бесконечная цепочка уравнений на α . Решать подобные системы лучше всего итерационно, поэтому откидывая в Γ_1 все петли, получаем нулевое приближение для α . Это приближение называют приближением среднего поля или приближением Ландау. Обычно все переходы рассматриваются в термодинамическом предельном переходе, поэтому имеется трансляционная инвариантность по пространственным переменным. В нашем случае такой инвариантности нет, поэтому возникают дифференциальные уравнения в частных производных. Однако от производной по τ можно избавиться

уже на этом этапе.

$$K = \partial_\tau - \frac{\Delta}{2m} - \mu \equiv \partial_\tau + \varepsilon \quad (12)$$

Далее представим α в следующем виде:

$$\alpha = a + ib \quad (13)$$

Теперь вернувшись к уравнению Швингера, будем дифференцировать по ψ и получим сопряженное уравнение. В силу же того, что $\psi(t) = \psi^+(-t)$ имеем (на примере a):

$$\begin{aligned} \partial_\tau a + \epsilon a + ga(a^2 + b^2) + \dots &= 0 \\ -\partial_\tau a + \epsilon b + gb(a^2 + b^2) + \dots &= 0 \end{aligned}$$

И аналогичное уравнение на b . Замечаем, что при сложении этих двух уравнений, производная по τ выпадает из рассмотрения. Таким образом, вместо исходного оператора K можно рассматривать некий другой оператор \bar{K} , в который не входит оператор дифференцирования по τ .

2 Уравнение на профиль конденсата в беспетлевом приближении

Сначала решим уравнение на профиль конденсата α (11) в беспетлевом приближении:

$$\left(-\frac{\Delta}{2m} - \mu\right)\alpha + g\alpha\alpha^+\alpha = 0$$

Для удобства положим $m = \frac{1}{2}$.

В данной работе рассматривается бозе-газ в магнитной ловушке с гармоническим потенциалом $V(x, y, z) = \omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2$. С учётом этого в уравнении появится добавка к энергии:

$$(-\Delta - \mu + V)\alpha + g|\alpha|^2\alpha = 0,$$

Будем решать сферически-симметричную задачу: $c \equiv \omega_x^2 = \omega_y^2 = \omega_z^2$

$$(-\Delta - \mu + c(x^2 + y^2 + z^2))\alpha + g|\alpha|^2\alpha = 0$$

Перепишем уравнение в сферических координатах:

$$(-\Delta - \mu + cr^2)\alpha + g|\alpha|^2\alpha = 0$$

Для упрощения вида уравнения сделаем растяжение переменных $\tilde{r} = \sqrt[4]{cr}$, $r \equiv \tilde{r}$ и положим $g = 1$. Окончательно:

$$(-\Delta - \mu + r^2)\alpha + |\alpha|^2\alpha = 0 \tag{14}$$

3 Решение уравнения на профиль

3.1 Ортонормированная система функций

Будем решать полученное в предыдущем параграфе уравнение на профиль (14) по теории возмущений. Однако заранее нельзя ничего сказать о сходимости решения, полученного таким способом. Обоснование применимости в данном случае этого способа решения будет приведено после.

В качестве ортонормированной системы функций выберем собственные функции оператора $-\Delta + r^2$:

$$(-\Delta + r^2)F(r, \theta, \varphi) = \lambda_n F(r, \theta, \varphi) \quad (15)$$

Это уравнение имеет вид уравнения Шрёдингера для трёхмерного квантового осциллятора:

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{m\omega^2(\hat{x}^2 + \hat{y}^2 + \hat{z}^2)}{2} \right) \Psi &= E_n \Psi \\ E_n &= \hbar\omega \left(n + \frac{3}{2} \right), n = 0, 1, \dots \\ \left(-\frac{\hbar}{m\omega}\Delta + \frac{m\omega(\hat{x}^2 + \hat{y}^2 + \hat{z}^2)}{\hbar} \right) \Psi &= 2 \left(n + \frac{3}{2} \right) \Psi \\ \hat{X} &\equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x}, \hat{Y} \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{y}, \hat{Z} \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{z} \\ (-\Delta + \hat{X}^2 + \hat{Y}^2 + \hat{Z}^2) \Psi &= 2 \left(n + \frac{3}{2} \right) \Psi \end{aligned}$$

В сферических координатах:

$$(-\Delta + r^2)\Psi = 2 \left(n + \frac{3}{2} \right) \Psi$$

Таким образом, известен спектр и нормированные собственные функции оператора $-\Delta + r^2$:

$$\begin{aligned} \lambda_n &= 2 \left(n + \frac{3}{2} \right), n = 0, 1, \dots \\ F_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) &= \frac{2^{\frac{l+1}{2}}}{\pi^{\frac{1}{4}}} \sqrt{\frac{2(n-l)!!}{(n+l+1)!!}} r^l e^{-\frac{1}{2}r^2} L_{\frac{1}{2}(n-l)}^{(l+\frac{1}{2})}(r^2) Y_{l,m}(\theta, \varphi) \end{aligned} \quad (16)$$

Где $L_{\frac{1}{2}(n-l)}^{(l+\frac{1}{2})}$ -обобщенные полиномы Лагерра. $k \equiv \frac{(n-l)}{2} \geq 0, k \in \{0, \mathbb{N}\}$

Из условия на k следует, что $n \geq l$ и n и l чётные или нечётные одновременно.

3.2 Построение теории возмущений

Для решения уравнения (14) по теории возмущений нужно определить малый параметр.

Сначала положим $\alpha = C_0 F_0$, где $F_0 \equiv F_{0,0,0}(r, \theta, \varphi)$, $(-\Delta + r^2)F_0 = \lambda_0 F_0$

$$(\lambda_0 - \mu)C_0 F_0 + C_0^3 |F_0|^2 F_0 = 0$$

Домножим скалярно обе части этого уравнения на F_0 .

$$(\lambda_0 - \mu)C_0 + C_0^3 \int dx |F_0|^4 = 0$$

$$C_0 = 0; C_0^2 = \frac{\mu - \lambda_0}{\int dx |F_0|^4}$$

Таким образом, при $\mu = \lambda_0$ существует только одно тривиальное решение. При $\mu > \lambda_0$ есть также нетривиальное решение.

Положим $\mu = \lambda_0 + \delta\mu$.

Для нахождения профиля будем строить теорию возмущений по малому параметру $\delta\mu$.

Процедура решения состоит в следующем:

1. Раскладываем $\alpha(r)$ по найденной системе собственных функций:

$$\begin{aligned} F_0(r) &\equiv F_{0,0,0}(r, \theta, \varphi) = \frac{e^{-\frac{1}{2}r^2}}{\pi^{\frac{3}{4}}} \\ F_1(r) &\equiv F_{2,0,0}(r, \theta, \varphi) = -\frac{\sqrt{6}e^{-\frac{1}{2}r^2}(2r^2 - 3)}{6\pi^{\frac{3}{4}}} \\ F_2(r) &\equiv F_{4,0,0}(r, \theta, \varphi) = \frac{\sqrt{30}e^{-\frac{1}{2}r^2}(4r^4 - 20r^2 + 15)}{60\pi^{\frac{3}{4}}} \\ F_3(r) &\equiv F_{6,0,0}(r, \theta, \varphi) = -\frac{\sqrt{35}e^{-\frac{1}{2}r^2}(8r^6 - 84r^4 + 210r^2 - 105)}{420\pi^{\frac{3}{4}}} \\ \alpha(r) &= \sum_{k=0}^3 C_k F_k(r) \end{aligned}$$

Мы положили индексы сферических функций $Y_{l,m}$ равными нулю, поскольку ищем сферически-симметричное решение.

2. Представляем коэффициенты C_k в виде ряда по степеням $\sqrt{\delta\mu}$: $C_k = \sum_{i=0} a_{k,2i+1} \delta\mu^{i+\frac{1}{2}}$.

3. Подставляем C_k и $\alpha(r)$ в уравнение $(-\Delta - \mu + r^2)\alpha + g |\alpha|^2 \alpha = 0$. Раскладываем правую часть по собственным функциям $F_k(r)$ и приравниваем полученные коэффициенты разложения к нулю. Решаем полученную систему относительно $a_{k,2i+1}$.

Таким образом, было получено решение с точностью до $\delta\mu^{\frac{7}{2}}$:

$$\alpha(r) = e^{-\frac{1}{2}r^2} (0.558\delta\mu^{\frac{7}{2}} - 0.124\delta\mu^{\frac{5}{2}} - 0.525\delta\mu^{\frac{5}{2}}r^2 - 0.667\delta\mu^{\frac{7}{2}}r^2 - 0.840\delta\mu^{\frac{3}{2}} + 4.12\delta\mu^{\frac{1}{2}} - 0.278\delta\mu^{\frac{3}{2}}r^4 + 0.266\delta\mu^{\frac{5}{2}}r^4 + 0.143\delta\mu^{\frac{7}{2}}r^4 + 2.05\delta\mu^{\frac{3}{2}}r^2 - 0.00719\delta\mu^{\frac{7}{2}}r^6 + 0.0143\delta\mu^{\frac{3}{2}}r^6 - 0.0187\delta\mu^{\frac{5}{2}}r^6)$$

Как видно, коэффициенты убывают и решение быстро сходится, что оправдывает данный способ решения.

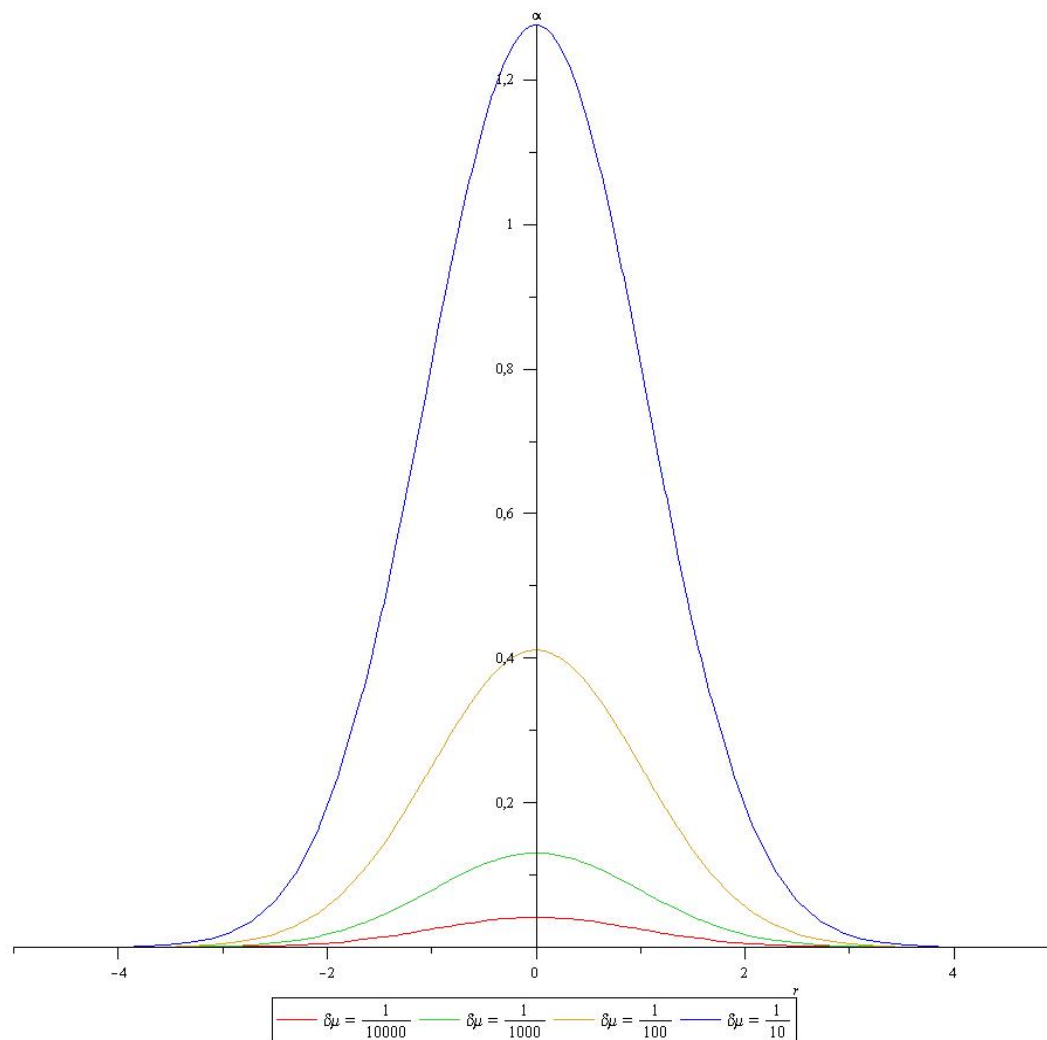


График зависимости профиля от координаты $\alpha(r)$ при четырёх различных значениях $\delta\mu$.

4 Функция Грина

Пусть φ -вещественное поле, тогда действие имеет вид:

$$S = \frac{1}{2}\varphi(-\Delta - \mu + r^2)\varphi + \frac{g}{4!}\varphi^4$$

Образование конденсата приводит к изменению поля: $\varphi \rightarrow \varphi + \alpha$

$$S = \frac{1}{2}\varphi(-\Delta - \mu + r^2)\varphi + \frac{g}{4!}\varphi^4 + \frac{g}{6}\varphi^3\alpha + \frac{g}{4}\varphi^2\alpha^2 + \frac{g}{6}\varphi\alpha^3 + \frac{g}{4!}\alpha^4 +$$

$$+ \frac{1}{2}\varphi(-\Delta - \mu + r^2)\alpha + \frac{1}{2}\alpha(-\Delta - \mu + r^2)\varphi + \frac{1}{2}\alpha(-\Delta - \mu + r^2)\alpha$$

(Интегрирование по времени и координатам опущено)

$$\frac{1}{2}\varphi(-\Delta - \mu + r^2)\alpha + \frac{1}{2}\alpha(-\Delta - \mu + r^2)\varphi = \varphi(-\Delta - \mu)\alpha$$

$\langle \varphi \rangle = \int D[\varphi]\varphi e^{-S}$. При разложении экспоненты в ряд получаем вклады:

$$\langle \varphi, \varphi((-\Delta - \mu + r^2)\alpha + \frac{g}{6}\alpha^3) \rangle = \text{---}$$

$$\langle \varphi, \frac{g}{6}\varphi^3\alpha \rangle = \text{---}$$

Будет искать пропагатор:

$$(-\Delta - \mu + r^2 + \frac{g}{4}\alpha^2)G(x, x') = \delta(x - x')$$

$$\hat{F} \equiv -\Delta - \mu + r^2,$$

Профиль $\alpha \rightarrow 0$ при $\delta\mu \rightarrow 0$ (см. (3.2)), поэтому положим:

$$\frac{g}{4}\alpha^2 \equiv \delta\mu f(x)$$

$$(\hat{F} + \delta\mu f(x))G(x, x') = \delta(x - x')$$

Зная спектр и собственные функции оператора $\hat{F} + \delta\mu f(x)$, можно найти пропагатор по формуле:

$$G(x, x') = \sum_n \frac{\bar{f}_n^*(x)\bar{f}_n(x')}{\bar{\lambda}_n}$$

Действительно,

$(\hat{F} + \delta\mu f(x)) \sum_n \frac{\bar{f}_n^*(x)\bar{f}_n(x')}{\bar{\lambda}_n} = \sum_n \frac{\bar{\lambda}_n \bar{f}_n^*(x)\bar{f}_n(x')}{\bar{\lambda}_n} = \sum_n \bar{f}_n^*(x)\bar{f}_n(x') = \delta(x - x')$ (в силу соотношения полноты).

Мы знаем спектр и собственные функции оператора $\hat{F} : \lambda_n - \mu, f_n$ (см. 16). Примем их за нулевое приближение и построим теорию возмущений по малому параметру $\delta\mu$:

$$\bar{f}_n = f_n + \sum_{i=1} f_{n,i} \delta\mu^i$$

$$\bar{\lambda}_n = \lambda_n - \mu + \sum_{i=1} \lambda_{n,i} \delta\mu^i$$

Опишем процедуру нахождения первой поправки.

$$\bar{f}_n = f_n + f_{n,1} \delta\mu$$

$$\bar{\lambda}_n = \lambda_n - \mu + \lambda_{n,1} \delta\mu$$

$$(\hat{F} + \delta\mu f)(f_n + f_{n,1} \delta\mu) = (\lambda_n + \lambda_{n,1} \delta\mu)(f_n + f_{n,1} \delta\mu)$$

$$\delta\mu : f f_n + \hat{F} f_{n,1} = \lambda_{n,1} f_n + \lambda_n f_{n,1}$$

Разложим $f_{n,1}$ по набору собственных функций оператора \hat{F}

$$f_{n,1} = \sum_i C_{1,i} f_i$$

С учётом $\hat{F} f_n = \lambda_n f_n$ получим:

$$f f_n + \sum_{i \neq n} C_{1,i} \lambda_i f_i = \lambda_{n,1} f_n + \lambda_n \sum_{i \neq n} C_{1,i} f_i \quad (17)$$

Домножим скалярно обе части этого уравнения на $f_i, i \neq n$:

$$\int f_i^* f f_n dx + C_{1,i} \lambda_i = \lambda_n C_{1,i}$$

$$C_{1,i} = \frac{\int f_i^* f f_n dx}{\lambda_n - \lambda_i}, i \neq n$$

C_{1n} находится из условия нормировки функции f_{n1} :

$$\int f_{n1}^* f_{n1} dx = 1$$

$$\sum_i C_{1i}^2 \int f_i^* f_i dx = \sum_i C_{1i}^2 = 1$$

$$C_{1,n} = \pm \sqrt{1 - \sum_{i \neq n} C_{1i}^2}$$

Теперь (17) домножим скалярно на f_n :

$$\lambda_{n,1} = \int f_n^* f(x) f_n dx$$

Производя аналогичные действия для следующих поправок по $\delta\mu$,

можно найти $C_{2,i}, \lambda_{n,2}, C_{3,i}, \lambda_{n,3} \dots$

Общая формула для нахождения коэффициентов:

$$C_{j,i} = \frac{\sum_k C_{j-1,k} \int f_i^* f f_k dx - \sum_{s=1}^{j-1} \lambda_{n,s} C_{j-s,i}}{\lambda_n - \lambda_i}, i \neq n$$

$$C_{j,n} = \pm \sqrt{1 - \sum_{i \neq n} C_{ji}^2}$$

$$\lambda_{n,j} = \sum_i C_{j-1,k} \int f_n^* f f_i dx - \sum_{s=1}^{j-1} \lambda_{n,s} C_{j-s,n}$$

В данной работе было посчитано шесть собственных значений и собственных функций $\bar{\lambda}_n, \bar{f}_n$ с точностью до $\delta\mu^{\frac{7}{2}}$ (см. приложение (А), (В)). В разложении $f_{n,i} = \sum_{k=1} C_{i,k} f_k$ использовалось шесть собственных функций f_k .

5 Среднее число частиц в системе

Большой термодинамический потенциал обладает следующим производящим свойством:

$$N = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{S,V}, \quad (18)$$

где N -среднее число частиц в системе.

$\Omega = -kT \ln \Sigma$, где Σ -статсумма.

$$\Sigma = \int D[\varphi^+] D[\varphi] e^{-S\beta}$$

$$\beta \equiv \frac{1}{kT}$$

Действие: $S = \int_0^\beta dt \int dx \varphi^+ (-\Delta + r^2 - \mu + \frac{g}{4}\alpha^2) \varphi$

С учетом приведенных формул выражение (18) преобразуется к виду:

$$N = kT \partial_\mu \ln \Sigma = kT \frac{\int D[\varphi^+] D[\varphi] e^{-S\beta} \beta \int_0^\beta dt \int dx \varphi^+ \varphi}{\int D[\varphi^+] D[\varphi] e^{-S\beta}} = \beta \int dx \langle \varphi^+ \varphi \rangle, \quad (19)$$

где $\langle \varphi^+ \varphi \rangle = \frac{\int D[\varphi^+] D[\varphi] e^{-S\beta} \varphi^+ \varphi}{\int D[\varphi^+] D[\varphi] e^{-S\beta}}$

Пропагатор: $G(x, x) = \langle \varphi^+(x) \varphi(x) \rangle = 0$

Но мы также знаем выражение для функции Грина через спектр и собственные функции оператора $-\Delta + r^2 - \mu + \frac{g}{4}\alpha^2$:

$$G(x, x) = \sum_n \frac{\bar{f}_n^*(x) \bar{f}_n(x)}{\lambda_n}$$

После его подстановки в (19) и взятия интеграла по x : $\int \bar{f}_n^*(x) \bar{f}_n(x) dx = 1$, выражение для N примет вид:

$$N = \beta \sum_n \frac{1}{\lambda_n} \quad (20)$$

В 4 были найдены собственные значения $\bar{\lambda}_n$ по теории возмущений по $\delta\mu$:

$$\bar{\lambda}_n = \lambda_n - \mu + \sum_i \lambda_{n,i} \delta\mu^i$$

В начале 3.2 мы определили $\delta\mu$ как малое возмущение химического потенциала относительно нулевого собственного значения:

$$\lambda_0 = \mu - \delta\mu$$

С учётом двух последних формул можно преобразовать слагаемое с $n = 0$ в (20):

$$\frac{1}{\lambda_0} = \frac{1}{\mu - \delta\mu - \mu + \lambda_0 - \mu + \sum_i \lambda_{0,i} \delta\mu^i} = \frac{1}{-\delta\mu + \sum_i \lambda_{0,i} \delta\mu^i}$$

В данной работе были посчитаны несколько первых коэффициентов $\lambda_{0,i}$ (приложение (A)):

$$\bar{\lambda}_0 = 3 - \mu + 1.5000\delta\mu + 0.081786\delta\mu^2 - 0.023061\delta\mu^3 - 0.0000085485\delta\mu^{7/2}.$$

Как видно, коэффициенты быстро убывают. Таким образом, при стремлении малого параметра $\delta\mu$ к нулю, получаем, что $\frac{1}{\lambda_0}$, а вместе с ним и число частиц N , безгранично растёт. Это обычно свидетельствует о том, что фазовый переход в системе невозможен. Однако в данных расчётах была учтена только одна диаграмма. Для вывода о наличии

или отсутствии фазового перехода этого может оказаться недостаточно, и следует рассматривать диаграммы следующих порядков.

6 Теория возмущений

Пусть $T > T_c$ и фазовый переход еще не произошёл, что соответствует $\alpha = 0$. В таком случае имеем выражение для плотности числа частиц: $n = \langle \varphi^+ \varphi \rangle = \int D[\varphi^+] D[\varphi] \varphi^+ \varphi e^{-S(\varphi)}$,
 $S = \frac{1}{2} \varphi^+ (-\Delta - \mu + r^2) \varphi + \frac{g}{4!} (\varphi^+ \varphi)^2$

Разложим поля φ, φ^+ по полной ортонормированной системе функций $F_{n,l,m}(r, \theta, \varphi)$ оператора $(-\Delta + r^2)$ (16):

$$\varphi = \sum_{n,l,m} C_{n,l,m} F_{n,l,m}(r, \theta, \varphi)$$

$$\varphi^+ = \sum_{n,l,m} C_{n,l,m}^* F_{n,l,m}^*(r, \theta, \varphi)$$

$$\begin{aligned} \text{Тогда } n &= \int D[\varphi^+] D[\varphi] \varphi^+ \varphi e^{-S(\varphi)} = \\ &= \prod_{n,l,m} \int dC_{n,l,m}^* dC_{n,l,m} (\sum_{n,l,m} C_{n,l,m}^* F_{n,l,m}^*) (\sum_{n,l,m} C_{n,l,m} F_{n,l,m}) e^{\frac{1}{2} \sum_{n,l,m} (\mu - \lambda_n) |C_{n,l,m}|^2} \cdot \\ &\cdot e^{-\frac{g}{4!} \int |\sum_{n,l,m} C_{n,l,m} F_{n,l,m}|^4 dx} \end{aligned}$$

$$(-\Delta + r^2) F_{n,l,m} = \lambda_n F_{n,l,m}$$


Рассмотрим только нулевую моду $\varphi = C_{0,0,0} F_{0,0,0}$:

$$n = \int dC_{0,0,0}^* dC_{0,0,0} |C_{0,0,0}|^2 |F_{0,0,0}|^2 e^{\frac{1}{2} (\mu - \lambda_0) |C_{0,0,0}|^2} e^{-\frac{g}{4!} |C_{0,0,0}|^4} \int |F_{0,0,0}|^4 dx =$$

$$\mu - \lambda_0 = \delta\mu$$

$$= \int dC_{0,0,0}^* dC_{0,0,0} |C_{0,0,0}|^2 |F_{0,0,0}|^2 e^{\frac{1}{2} \delta\mu |C_{0,0,0}|^2} e^{-\frac{g}{4!} |C_{0,0,0}|^4} \int |F_{0,0,0}|^4 dx \sim \begin{array}{c} \nabla + \text{figure-eight} + \text{cup} + \text{figure-eight} + \dots \end{array}$$

Диаграммы приведены без симметричных коэффициентов.

Заметим, что интеграл не имеет особенностей при стремлении $\delta\mu$ к нулю. В (5) было показано, что при учёте лишь одной диаграммы  появляется расходимость. Теперь же мы получили, что при суммировании следующих петель сингулярность пропадает. Следовательно, μ меняет знак в критической точке и фазовый переход в нашей системе осуществим (если понимать термин "фазовый переход" в смысле образования аномальной плотности).

7 Заключение

В данной работе была сделана попытка описания фазового перехода в бозе-газе, находящемся во внешнем гармоническом потенциале вблизи критической точки. Уравнение на профиль конденсата было решено в беспетлевом приближении по теории возмущений, построен график профиля при различных значениях малого параметра. Построенное решение оказалось хорошо сходящимся. Также по теории возмущений были найдены собственные функции и собственные значения оператора $-\Delta - \mu + r^2 + \frac{g}{4}\alpha^2$. Через них был выражен пропагатор и получено выражение для плотности числа частиц. Проведен его анализ и как оказалось, в нулевой моде имеется особенность. Далее выяснилось, это объясняется тем, что в нашей теории недостаточно учитывать только одну диаграмму. На основании проведенных исследований был сделан вывод о возможности существования фазового перехода в системе в смысле образования аномальной плотности (плотности конденсата).

Список литературы

- [1] А.Н. Васильев. Функциональные методы в квантовой теории поля и статистике. Спб.: Ленинград, 1976. 295 с.
- [2] Комарова М.В., Налимов М.Ю., Новожилова Т.Ю. "Фазовые переходы в квантовых системах: сверхтекучесть и сверхпроводимость учебное пособие.
- [3] Л.П.Питаевский. Конденсация Бозе-Эйнштейна в магнитных ловушках. Введение в теорию. УФН, т.168, н.6, с.641-653 (1998)
- [4] Shi Yu-Ren, Wang Xue-Ling, Wang Guang-Hui, Liu Cong-Bo, Yang Hong-Juan. Analytical Solutions for the Two-Dimensional Gross-Pitaevskii Equation with a Harmonic Trap. Communications in Theoretical Physics, March 15, 2013, Vol. 59, No. 3, p.273-278.
- [5] А.В.Горохов "Атомные конденсаты и атомный лазер". Соросовский образовательный журнал, т.7, н.1, 2001

А Собственные значения оператора $-\Delta - \mu + r^2 + \frac{g}{4}\alpha^2$

$$\bar{\lambda}_0 = 3 - \mu + 1.5000\delta\mu + 0.081786\delta\mu^2 - 0.023061\delta\mu^3 - 0.0000085485\delta\mu^{7/2}$$

$$\bar{\lambda}_1 = 7 - \mu + 0.93750\delta\mu + 0.062815\delta\mu^2 - 0.058353\delta\mu^3 - 0.00011957\delta\mu^{7/2}$$

$$\bar{\lambda}_2 = 11 - \mu + 0.73828\delta\mu + 0.044567\delta\mu^2 - 0.063309\delta\mu^3 - 0.00032748\delta\mu^{7/2}$$

$$\bar{\lambda}_3 = 15 - \mu + 0.62842\delta\mu - 0.063359\delta\mu^3 + 0.042909\delta\mu^2 - 0.00065320\delta\mu^{7/2}$$

$$\bar{\lambda}_4 = 19 - \mu + 0.55641\delta\mu + 0.058673\delta\mu^2 - 0.057462\delta\mu^3 - 0.0012573\delta\mu^{7/2}$$

$$\bar{\lambda}_5 = 23 - \mu + 0.50456\delta\mu + 0.10592\delta\mu^2 - 0.031080\delta\mu^3$$

В Собственные функции оператора $-\Delta - \mu + r^2 + \frac{g}{4}\alpha^2$

$$\begin{aligned} \bar{f}_0 = e^{-\frac{1}{2}r^2} & (0.424 + 0.0445\delta\mu^{5/2}r^2 + 0.0162\delta\mu^3r^4 + 0.000140\delta\mu^2r^8 + 0.0492\delta\mu^2r^2 - 3.33 \cdot \\ & 10^{-7}\delta\mu^3r^{10} + 0.0366\delta\mu^3r^2 - 0.0385\delta\mu r^4 + 0.00500\delta\mu r^6 + 0.184\delta\mu r^2 + 0.00000827\delta\mu r^{10} + \\ & 0.0174\delta\mu^{5/2}r^4 - 0.00308\delta\mu^{5/2}r^6 + 0.00500\delta\mu^{3/2}r^6 - 0.0385\delta\mu^{3/2}r^4 - 0.000331\delta\mu^{3/2}r^8 - 3.33 \cdot \\ & 10^{-7}\delta\mu^{5/2}r^{10} - 0.000331\delta\mu r^8 + 0.184\delta\mu^{3/2}r^2 + 0.0165\delta\mu^2r^4 - 0.00299\delta\mu^2r^6 - 0.00281\delta\mu^3r^6 + \\ & 0.000143\delta\mu^{5/2}r^8 + 0.000141\delta\mu^3r^8 - 3.33 \cdot 10^{-7}\delta\mu^2r^{10} + 0.00000827\delta\mu^{3/2}r^{10} + 0.0158\delta\mu^{7/2}r^4 - \\ & 3.33 \cdot 10^{-7}\delta\mu^{7/2}r^{10} + 0.0391\delta\mu^{7/2}r^2 - 0.00280\delta\mu^{7/2}r^6 + 0.000141\delta\mu^{7/2}r^8 + 0.327\delta\mu^{7/2} + 0.315\delta\mu^{5/2} + \\ & 0.244\delta\mu + 0.328\delta\mu^3 + 0.307\delta\mu^2 + 0.232\delta\mu^{3/2} + 0.424\delta\mu^{1/2}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \bar{f}_1 = e^{-\frac{1}{2}r^2} & (0.515 - 0.343\delta\mu^{1/2}r^2 - 0.118\delta\mu^{5/2}r^2 - 0.0564\delta\mu^3r^4 - 0.000497\delta\mu^2r^8 - 0.104\delta\mu^2r^2 + \\ & 0.0000163\delta\mu^3r^{10} - 0.146\delta\mu^3r^2 - 0.112\delta\mu r^4 + 0.0152\delta\mu r^6 - 0.0454\delta\mu r^2 + 0.0000272\delta\mu r^{10} - \\ & 0.0641\delta\mu^{5/2}r^4 + 0.00638\delta\mu^{5/2}r^6 + 0.0152\delta\mu^{3/2}r^6 - 0.112\delta\mu^{3/2}r^4 - 0.00106\delta\mu^{3/2}r^8 + \\ & 0.0000163\delta\mu^{5/2}r^{10} - 0.00106\delta\mu r^8 - 0.0297\delta\mu^{3/2}r^2 - 0.0681\delta\mu^2r^4 + 0.00677\delta\mu^2r^6 + 0.00590\delta\mu^3r^6 - \\ & 0.000483\delta\mu^{5/2}r^8 - 0.000477\delta\mu^3r^8 + 0.0000163\delta\mu^2r^{10} + 0.0000272\delta\mu^{3/2}r^{10} - 0.0565\delta\mu^{7/2}r^4 + \\ & + 0.0000163\delta\mu^{7/2}r^{10} - 0.147\delta\mu^{7/2}r^2 + 0.00590\delta\mu^{7/2}r^6 - 0.000477\delta\mu^{7/2}r^8 + 0.457\delta\mu^{7/2} + \\ & 0.438\delta\mu^{5/2} - 0.343r^2 + 0.440\delta\mu + 0.454\delta\mu^3 + 0.433\delta\mu^2 + 0.416\delta\mu^{3/2} + 0.515\delta\mu^{1/2}) \end{aligned}$$

$$\bar{f}_2 = e^{-\frac{1}{2}r^2} (-0.773\delta\mu^{1/2}r^2 - 0.464\delta\mu^{5/2}r^2 - 0.0191\delta\mu^3r^4 - 0.00195\delta\mu^2r^8 - 0.455\delta\mu^2r^2$$

$$\begin{aligned}
& + 0.0000522\delta\mu^3r^{10} - 0.476\delta\mu^3r^2 - 0.0408\delta\mu r^4 + 0.0348\delta\mu r^6 - 0.469\delta\mu r^2 + 0.0000612\delta\mu r^{10} - \\
& 0.0246\delta\mu^{5/2}r^4 + 0.0297\delta\mu^{5/2}r^6 + 0.0348\delta\mu^{3/2}r^6 - 0.0459\delta\mu^{3/2}r^4 - 0.00237\delta\mu^{3/2}r^8 + \\
& 0.0000522\delta\mu^{5/2}r^{10} - 0.00237\delta\mu r^8 - 0.443\delta\mu^{3/2}r^2 - 0.0297\delta\mu^2r^4 + 0.0304\delta\mu^2r^6 + 0.0290\delta\mu^3r^6 \\
& - 0.00193\delta\mu^{5/2}r^8 - 0.00192\delta\mu^3r^8 + 0.0000522\delta\mu^2r^{10} + 0.0000612\delta\mu^{3/2}r^{10} - 0.0182\delta\mu^{7/2}r^4 + \\
& 0.0000522\delta\mu^{7/2}r^{10} - 0.478\delta\mu^{7/2}r^2 + 0.0290\delta\mu^{7/2}r^6 - 0.00192\delta\mu^{7/2}r^8 + 0.517\delta\mu^{7/2} + 0.517\delta\mu^{5/2} \\
& + 0.155\delta\mu^{1/2}r^4 + 0.58 - 0.773r^2 + 0.545\delta\mu + 0.515\delta\mu^3 + 0.515\delta\mu^2 + 0.524\delta\mu^{3/2} + 0.155r^4 + \\
& 0.580\delta\mu^{1/2})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\bar{f}_3 = e^{-\frac{1}{2}r^2} & (-1.26\delta\mu^{1/2}r^2 - 0.955\delta\mu^{5/2}r^2 + 0.241\delta\mu^3r^4 - 0.00514\delta\mu^2r^8 - 0.953\delta\mu^2r^2 + \\
& 0.000123\delta\mu^3r^{10} - 0.940\delta\mu^3r^2 + 0.275\delta\mu r^4 + 0.0103\delta\mu r^6 - 1.03\delta\mu r^2 + 0.000121\delta\mu r^{10} + 0.245\delta\mu^{5/2}r^4 + \\
& 0.0145\delta\mu^{5/2}r^6 + 0.0116\delta\mu^{3/2}r^6 + 0.262\delta\mu^{3/2}r^4 - 0.00491\delta\mu^{3/2}r^8 + 0.000123\delta\mu^{5/2}r^{10} - 0.00491\delta\mu r^8 - \\
& 0.993\delta\mu^{3/2}r^2 + 0.242\delta\mu^2r^4 + 0.0152\delta\mu^2r^6 + 0.0149\delta\mu^3r^6 - 0.00509\delta\mu^{5/2}r^8 - 0.00512\delta\mu^3r^8 + \\
& 0.000123\delta\mu^2r^{10} + 0.000121\delta\mu^{3/2}r^{10} + 0.240\delta\mu^{7/2}r^4 + 0.000123\delta\mu^{7/2}r^{10} - 0.940\delta\mu^{7/2}r^2 + \\
& 0.0150\delta\mu^{7/2}r^6 - 0.00512\delta\mu^{7/2}r^8 + 0.575\delta\mu^{7/2} + 0.590\delta\mu^{5/2} + 0.504\delta\mu^{1/2}r^4 - 1.26r^2 + 0.633\delta\mu + \\
& 0.575\delta\mu^3 + 0.592\delta\mu^2 + 0.615\delta\mu^{3/2} - 0.0479\delta\mu^{1/2}r^6 + 0.630 + 0.504r^4 - 0.0479r^6 + 0.630\delta\mu^{1/2})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\bar{f}_4 = e^{-\frac{1}{2}r^2} & (-1.78\delta\mu^{1/2}r^2 - 1.60\delta\mu^{5/2}r^2 + 0.831\delta\mu^3r^4 + 0.00218\delta\mu^2r^8 - \\
& 1.62\delta\mu^2r^2 + 0.000322\delta\mu^3r^{10} - 1.59\delta\mu^3r^2 + 0.909\delta\mu r^4 - 0.142\delta\mu r^6 - 1.71\delta\mu r^2 + 0.000271\delta\mu r^{10} + \\
& 0.838\delta\mu^{5/2}r^4 - 0.125\delta\mu^{5/2}r^6 - 0.138\delta\mu^{3/2}r^6 + 0.888\delta\mu^{3/2}r^4 + 0.00359\delta\mu^{3/2}r^8 + \\
& 0.000322\delta\mu^{5/2}r^{10} + 0.00383\delta\mu r^8 - 1.68\delta\mu^{3/2}r^2 + 0.841\delta\mu^2r^4 - 0.126\delta\mu^2r^6 - 0.124\delta\mu^3r^6 + \\
& 0.00213\delta\mu^{5/2}r^8 + 0.00213\delta\mu^3r^8 + 0.000322\delta\mu^2r^{10} + 0.000271\delta\mu^{3/2}r^{10} + 0.831\delta\mu^{7/2}r^4 + \\
& 0.000322\delta\mu^{7/2}r^{10} - 1.59\delta\mu^{7/2}r^2 - 0.124\delta\mu^{7/2}r^6 + 0.00213\delta\mu^{7/2}r^8 + 0.660\delta\mu^{7/2} + \\
& 0.671\delta\mu^{5/2} + 1.06\delta\mu^{1/2}r^4 - 1.78r^2 + 0.717\delta\mu + 0.660\delta\mu^3 + 0.678\delta\mu^2 + 0.706\delta\mu^{3/2} + \\
& 0.0113\delta\mu^{1/2}r^8 + 0.667 - 0.203\delta\mu^{1/2}r^6 + 1.06r^4 - 0.203r^6 + 0.0113r^8 + 0.667\delta\mu^{1/2})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\bar{f}_5 = e^{-\frac{1}{2}r^2} & (-2.33\delta\mu^{1/2}r^2 - 2.65\delta\mu^{5/2}r^2 + 2.03\delta\mu^3r^4 + 0.0601\delta\mu^2r^8 - 2.65\delta\mu^2r^2 - 0.00213\delta\mu^3r^{10} - \\
& 2.64\delta\mu^3r^2 + 2.03\delta\mu r^4 - 0.560\delta\mu r^6 - 2.65\delta\mu r^2 - 0.00215\delta\mu r^{10} + 2.03\delta\mu^{5/2}r^4 - 0.560\delta\mu^{5/2}r^6 - \\
& 0.556\delta\mu^{3/2}r^6 + 2.01\delta\mu^{3/2}r^4 + 0.0601\delta\mu^{3/2}r^8 - 0.00213\delta\mu^{5/2}r^{10} + 0.0608\delta\mu r^8 - 2.63\delta\mu^{3/2}r^2 + \\
& 2.03\delta\mu^2r^4 - 0.560\delta\mu^2r^6 - 0.560\delta\mu^3r^6 + 0.0601\delta\mu^{5/2}r^8 + 0.0601\delta\mu^3r^8 - 0.00213\delta\mu^2r^{10} - 0.00213\delta\mu^{3/2}r^{10} + \\
& 2.03\delta\mu^{7/2}r^4 - 0.00213\delta\mu^{7/2}r^{10} - 2.64\delta\mu^{7/2}r^2 - 0.560\delta\mu^{7/2}r^6 + 0.0601\delta\mu^{7/2}r^8 + 0.832\delta\mu^{7/2} +
\end{aligned}$$

$$0.839\delta\mu^{5/2} + 1.86\delta\mu^{1/2}r^4 - 2.33r^2 - 0.00215\delta\mu^{1/2}r^{10} + 0.701 + 0.843\delta\mu + 0.832\delta\mu^3 + 0.839\delta\mu^2 + \\ 0.836\delta\mu^{3/2} + 0.0593\delta\mu^{1/2}r^8 - 0.533\delta\mu^{1/2}r^6 + 1.86r^4 - 0.533r^6 + 0.0593r^8 - 0.00215r^{10} + \\ 0.701\delta\mu^{1/2})$$