5 Bose-Einstein-Kondensation. Suprafluidität

Wie im Fall der Fermionen betrachten wir in diesem Kapitel zunächst nicht wechselwirkende Bosonen. Dennoch ist dieser Fall nichttrivial, da als Folge der Bose-Einstein-Statistik ein Phasenübergang, die Bose-Einstein-Kondensation, bei einer endlichen Temperatur in drei Dimensionen stattfindet. Nach einem Überblick der Bose-Einstein-Kondensation diskutieren wir am Ende des Kapitels die Suprafluidität, ein Zustand bei dem die innere Reibung verschwindet. Wie bei der Bose-Einstein-Kondensation entsteht die Suprafluidität bei einem Phasenübergang bei endlicher Temperatur. Jedoch ist in letzterer die Wechselwirkung essentiell.

5.1 Das ideale Bosegas

Wir betrachten hier nicht wechselwirkende Bosonen im dreidimensionalen homogenen Raum. Wie wir schon im letzten Kapitel gesehen haben, ist es zweckmäßig periodische Randbedingungen einzuführen. Der Hamiltonoperator für N Bosonen der Masse m sieht in erster Quantisierung wie folgt aus.

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{\vec{p}_i^2}{2m} , \tag{5.1}$$

mit $\vec{p}_i$ der Impulsoperator des Teilchens i. In zweiter Quantisierung geht dieser Hamiltonoperator über in

$$H = \sum_{\alpha,\beta} b_\alpha^\dagger \langle\alpha| \frac{\vec{p}^2}{2m} |\beta\rangle b_\beta , \tag{5.2}$$

wobei α und β Quantenzahlen einer Einteilchenbasis kennzeichnen. Im Fall von Bosonen ohne innere Freiheitsgrade (spinlose Bosonen) ist die Quantenzahl durch den Impuls (4.6) gegeben. Somit ist der Hamiltonoperator in zweiter Quantisierung

$$H = \sum_{\vec{k},\sigma} \epsilon_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}} \tag{5.3}$$

mit

$$\epsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} . \tag{5.4}$$

Bei gegeber Dispersion der Energieeigenwerte können wir die Zustandsdichte wie im Fall der Fermionen erhalten, da in dieser Rechnung die Statistik der Teilchen keine Rolle spielt. Da bei spinlosen Teilchen der Entartungsfaktor $g = 1$ ist, haben wir aus (4.24)

$$\rho(E) = \frac{1}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} E^{1/2} . \tag{5.5}$$

5.1.1 Thermodynamische Eigenschaften des idealen Bosegases

Die thermodynamischen Eigenschaften können aus der Zustandssumme im großkanonischen Ensemble erhalten werden. Aus (3.75) haben wir

$$Z = \prod_{\vec{k}} \left\{1 - \exp\left[\beta\left(\mu - \epsilon_{\vec{k}}\right)\right]\right\}^{-1} . \tag{5.6}$$

Somit haben wir für das großkanonische Potential

$$\begin{aligned}
\Omega(T,V,\mu) &= -k_B T \ln Z \\
&= k_B T \sum_{\vec{k}} \ln\left\{1 - \exp\left[\beta\left(\mu - \epsilon_{\vec{k}}\right)\right]\right\} \\
&= k_B T \frac{V}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty \mathrm{d}\epsilon \epsilon^{1/2} \ln\left[1 - \mathrm{e}^{\beta(\mu-\epsilon)}\right] \\
&= -\frac{V}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \frac{2}{3}\int_0^\infty \mathrm{d}\epsilon \frac{\epsilon^{3/2}}{\mathrm{e}^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1} ,
\end{aligned} \tag{5.7}$$

wobei der Übergang zur dritten Zeile mit Hilfe von (4.33) und (5.5) durchgeführt wurde und die letzte Zeile durch Teilintegration erreicht wurde.

Wie im Fall des Fermigases betrachten wir im Folgenden verschiedene thermodynamische Beziehungen. Aus dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik (3.65) wissen wir, dass $E = E(S,V,N)$. Da alle drei Variablen extensive Größen sind, ist die innere Energie eine homogene Funktion ersten Grades, die sich bei Reskalierung der Variablen wie folgt verhält:

$$\lambda E = E(\lambda S, \lambda V, \lambda N) . \tag{5.8}$$

Durch Ableitung der obigen Gleichung nach λ an der Stelle $\lambda = 1$ erhält man

$$E = S \left.\frac{\partial E}{\partial S}\right|_{V,N} + V \left.\frac{\partial E}{\partial V}\right|_{S,N} + N \left.\frac{\partial E}{\partial N}\right|_{S,V} . \tag{5.9}$$

Ein Vergleich mit (3.65) führt zu

$$E = TS - PV + \mu N , \tag{5.10}$$

dass zusammen mit (4.26) ergibt

$$\Omega = -PV , \tag{5.11}$$

Die Beziehung dieser thermodynamischen Größen zu den mikroskopischen Eigenschaften des Bosegases kann mit Hilfe von (5.7) hergestellt werden.

Auf der anderen Seite können wir die innere Energie berechnen:

$$
\begin{aligned}
E &= \sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} \\
&= \sum_{\vec{k}} \frac{\epsilon_{\vec{k}}}{\exp\left[\beta\left(\epsilon_{\vec{k}}-\mu\right)\right]} \\
&= V \int_0^\infty \mathrm{d}\epsilon \frac{\rho(\epsilon)\,\epsilon}{\mathrm{e}^{\beta(\epsilon-\mu)}-1} \\
&= \frac{V}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty \mathrm{d}\epsilon \frac{\epsilon^{3/2}}{\mathrm{e}^{\beta(\epsilon-\mu)}-1} \; .
\end{aligned} \tag{5.12}
$$

Durch ein Vergleich mit (5.7) erhalten wir die Zustandsgleichung des idealen Bosegases:

$$
PV = \frac{2}{3} E \; . \tag{5.13}
$$

Bei hohen Temperaturen erwarten wir, dass die Gl. (5.13) die bekannte Form für das klassische ideale Gas erreicht. Da diese die Anzahl der Teilchen beinhaltet, betrachten wir, wie N aus dem großkanonischen Potential erhalten wird:

$$
N = - \left.\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}\right|_{T,V} = \frac{V}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty \mathrm{d}\epsilon \frac{\epsilon^{1/2}}{\mathrm{e}^{\beta(\epsilon-\mu)}-1} \; . \tag{5.14}
$$

Um den Limes hoher Temperatur zu nehmen, brauchen wir das Verhalten von μ als Funktion der Temperatur. Wir können ein qualitatives Bild durch Betrachtung der mittleren Besetzunsgzahl erreichen:

$$
n_{\vec{k}} = \frac{1}{\exp\left[\beta\left(\epsilon_{\vec{k}}-\mu\right)\right]-1} \; . \tag{5.15}
$$

Da $n_{\vec{k}} \geq 0$ sein muß, muß $\epsilon_{\vec{k}} - \mu \geq 0 \; \forall \; \vec{k}$ gelten. Insbesondere für $\vec{k} = 0$ ist $\epsilon_{\vec{k}} = 0$, so dass $\mu < 0$ sein muß. Dies gilt für alle Temperaturen. Für sehr hohe Temperaturen erwarten wir, dass in einem statistischen Ensemble keine Quanteneffekte zu beobachten sind. Somit soll der Unterschied zwischen Bosonen und Fermionen verschwinden, d.h.

$$
n^F = \frac{1}{\exp\left[\beta\left(\epsilon_{\vec{k}}-\mu\right)\right]+1} \simeq n^B = \frac{1}{\exp\left[\beta\left(\epsilon_{\vec{k}}-\mu\right)\right]-1} \; . \tag{5.16}
$$

Dies kann nur erreicht werden falls $\exp\left[\beta\left(\epsilon_{\vec{k}}-\mu\right)\right] \gg 1$ ist, mit der Folge

$$
\frac{\mu}{k_B T} \stackrel{T\to\infty}{\longrightarrow} -\infty \; . \tag{5.17}
$$

In diesem Fall haben wir

$$n(\epsilon) = \mathrm{e}^{-\beta(\epsilon-\mu)} \ , \tag{5.18}$$

und somit die Boltzmann-Verteilung der klassischen Statistischen Physik. In der Tat führt die Boltzmann-Verteilung durch Einsetzen in (5.12) zur folgenden Form der inneren Energie:

$$\begin{aligned} E &\simeq \frac{V}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\int_0^\infty \mathrm{d}\epsilon\, \epsilon^{3/2}\, \mathrm{e}^{-\beta(\epsilon-\mu)} \\ &= \frac{3}{2}k_B T \frac{V}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\int_0^\infty \mathrm{d}\epsilon\, \epsilon^{1/2}\, \mathrm{e}^{-\beta(\epsilon-\mu)} \ . \end{aligned} \tag{5.19}$$

Das letzte Integral entspricht (5.14) mit der Boltzmann-Verteilung anstelle der Bose-Einstein-Besetzungszahl. Dadurch erhalten wir

$$PV = k_B T N \ , \tag{5.20}$$

die Zustandsgleichung eines klassischen idealen Gases. Unsere Vermutung (5.17) kann bestätigt werden, indem wir die obige Näherung für (5.14) direkt einsetzen.

$$N \simeq \sum_{\vec{k}} \exp\left[-\beta\left(\epsilon_{\vec{k}} - \mu\right)\right] \ . \tag{5.21}$$

Für die Summe über $\vec{k}$ haben wir

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{k}} \exp\left[-\beta\epsilon_{\vec{k}}\right] &= \frac{V}{(2\pi)^3}\int \mathrm{d}^3k\, \exp\left(-\beta\frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}\right) \\ &= V\left(\frac{mk_BT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \ . \end{aligned} \tag{5.22}$$

Somit haben wir

$$\frac{\mu}{k_BT} = \ln\left[\frac{N}{V}\left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_BT}\right)^{3/2}\right] \stackrel{T\to\infty}{\longrightarrow} -\infty \ . \tag{5.23}$$

Da die obige Beziehung zu $\mu/k_BT \to +\infty$ für $T \to 0$ führt , gibt es eine endliche Temperatur T_0 bei der die klassische Beziehung vollkommen ungültig wird. Um diese Temperatur zu erhalten, kehren wir zum Ausdruck (5.14) zurück und setzen $\mu = 0$.

$$\begin{aligned} \frac{N}{V} &= \frac{1}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\int_0^\infty \mathrm{d}\epsilon \frac{\epsilon^{1/2}}{\mathrm{e}^{\epsilon/k_BT_0}-1} \\ &= \frac{1}{4\pi^2}\left(\frac{2mk_BT_0}{\hbar^2}\right)^{3/2} I \ , \end{aligned} \tag{5.24}$$

wobei

$$I = \int_0^\infty \mathrm{d}x \, \frac{x^{1/2}}{\mathrm{e}^x - 1} \; . \tag{5.25}$$

I.A. hat man

$$\int_0^\infty \mathrm{d}x \, \frac{x^{n-1}}{\mathrm{e}^x - 1} = \Gamma(n)\,\zeta(n) \; , \quad n > 1 \; , \tag{5.26}$$

mit den folgenden Definitionen für die Gamma-Funktion

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty \mathrm{e}^{-t} t^{z-1} \mathrm{d}t \; , \quad \mathrm{Re}\, z > 0 \; , \tag{5.27}$$

und die Riemannsche Zeta-Funktion

$$\zeta(z) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^z} \; , \quad \mathrm{Re}\, z > 1 \; . \tag{5.28}$$

Damit hat man schließlich

$$\begin{aligned} T_0 &= \frac{\hbar^2}{2mk_B} \left[\frac{4\pi^2}{\Gamma(3/2)\zeta(3/2)} \right]^{2/3} \left(\frac{N}{V} \right)^{2/3} \\ &\simeq 3.31 \frac{\hbar^2}{mk_B} \left(\frac{N}{V} \right)^{2/3} \; . \end{aligned} \tag{5.29}$$

5.2 Die Bose-Einstein-Kondensation

Die Temperatur T_0, bei der das chemische Potential verschwindet, führt zu einer massiven Besetzung des Zustandes mit tiefster Energie:

$$n(\epsilon = 0) = \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta_0(\epsilon=0)} - 1} = \infty \; . \tag{5.30}$$

Eigentlich muß bei einer endlichen Zahl N von Teilchen $\mu = 0^-$ ($\mu/k_B T_0 \simeq -1/N$) sein. Die Anzahl der Teilchen mit Energien zwischen ϵ und $\epsilon + \mathrm{d}\epsilon$ für $T \leq T_0$ ist

$$\mathrm{d}N_\epsilon = \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{\epsilon^{1/2} \mathrm{d}\epsilon}{\mathrm{e}^{\beta(\epsilon - 0^-)} - 1} \; . \tag{5.31}$$

Somit sieht man, dass die Teilchen mit $\epsilon = 0$ keinen Beitrag zum obigen Ausdruck liefern. Wenn wir über Gl. (5.31) integrieren erhalten wir

$$\frac{N(\epsilon > 0)}{V} = \frac{1}{4\pi^2} \left(\frac{2mk_B T}{\hbar^2} \right)^{3/2} I = \frac{N}{V} \left(\frac{T}{T_0} \right)^{3/2} \; , \tag{5.32}$$

wobei I in (5.25) definiert wurde und die letzte Gleichung mit Hilfe von (5.24) aufgestellt wurde. Demnach ist die Anzahl der Teilchen im tiefsten Zustand

$$\frac{N(\epsilon=0)}{V} = \frac{N}{V}\left[1-\left(\frac{T}{T_0}\right)^{3/2}\right] , \quad T \leq T_0 \, . \tag{5.33}$$

Somit sehen wir, dass für $T \leq T_0$ der tiefste Zustand makroskopisch besetzt wird. Diese ist die Bose-Einstein-Kondensation.

Wir betrachten zunächst Eigenschaften des Systems bei $T < T_0$. Die innere Energie wird durch die Zustände mit $\epsilon > 0$ bestimmt, d.h. durch die Teilchen, die sich nicht im Kondensat befinden. Aus der Gl. (5.12) haben wir

$$\begin{aligned}\frac{E}{V} &= \frac{1}{4\pi^2}\left(\frac{2mk_BT}{\hbar^2}\right)^{3/2} k_BT \int_0^\infty \mathrm{d}x \, \frac{x^{3/2}}{\mathrm{e}^x-1} \\ &= \frac{1}{4\pi^2}\left(\frac{2mk_BT}{\hbar^2}\right)^{3/2} k_BT \, \zeta\,(5/2)\,\Gamma\,(5/2) \, .\end{aligned} \tag{5.34}$$

Setzten wir diesen Ausdruck in Bezug auf T_0, dann erhalten wir

$$E = \frac{\zeta\,(5/2)\,\Gamma\,(5/2)}{\zeta\,(3/2)\,\Gamma\,(3/2)} N k_B T \left(\frac{T}{T_0}\right)^{3/2} , \quad T \leq T_0 \, . \tag{5.35}$$

Bei verschwindender Temperatur befinden sich alle Teilchen im Kondensat, so dass die innere Energie Null wird.

Aus der inneren Energie können wir die spezifische Wärme berechnen:

$$c_V = \left.\frac{\partial E}{\partial T}\right|_V = \frac{5}{2}\frac{\zeta\,(5/2)\,\Gamma\,(5/2)}{\zeta\,(3/2)\,\Gamma\,(3/2)} N k_B \left(\frac{T}{T_0}\right)^{3/2} , \quad T \leq T_0 \, . \tag{5.36}$$

Die spezifische Wärme verschwindet auch im Limes $T \to 0$.

Mit Hilfe der Zustandsgleichung (5.13) können wir auch den Druck erhalten

$$P = \frac{2}{3}\frac{E}{V} = \frac{\zeta\,(5/2)\,\Gamma\,(5/2)}{6\pi^2}\left(\frac{2mk_BT}{\hbar^2}\right)^{3/2} k_BT \sim (k_BT)^{5/2} , \quad T \leq T_0 \, . \tag{5.37}$$

Der Druck verschwindet für $T \to 0$, im klaren Gegensatz zum Verhalten des Fermigases.

Im Folgenden diskutieren wir die Eigenschaften des Bosegases für Temperaturen $T > T_0$. Wie wir oben gesehen haben, spielt das Verhalten des chemischen Potentials eine entscheidende Rolle. Um es für Temperaturen $T > T_0$ zu untersuchen, betrachten wir Gl. (5.14), welche die Anzahl der Teilchen angibt. Wir beschränken uns auf ein Gebiet in der Nähe von T_0, so dass $\mu \lesssim 0$ ist. In diesem Fall können wir im Prinzip N nach Potenzen von μ entwickeln. Der Term nullter Ordnung entspricht einem fiktiven System von Bosonen mit $\mu = 0$. Die Anzahl der Teilchen in diesem System ist

$$\tilde{N}(T) = \frac{V}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\int_0^\infty \mathrm{d}\epsilon \frac{\epsilon^{1/2}}{\mathrm{e}^{\beta\epsilon}-1} \,. \tag{5.38}$$

Da aus den Gln. (5.33) und (5.32) folgt, dass $\tilde{N}(T_0) = N$ ist, haben wir aus (5.32)

$$\frac{\tilde{N}(T_0)}{N} = \left(\frac{T}{T_0}\right)^{3/2} \,. \tag{5.39}$$

Nun betrachten wir

$$N - \tilde{N}(T) = \frac{V}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\int_0^\infty \mathrm{d}\epsilon\, \epsilon^{1/2}\left\{\frac{1}{\mathrm{e}^{\beta(\epsilon-\mu)}-1} - \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta\epsilon}-1}\right\} \,. \tag{5.40}$$

Für $T \simeq T_0$ ist $\mu \sim 0$ und wir können den Integrand entwickeln. Für $\epsilon \gg k_B T$ und $\mu \simeq 0$, verschwindet die Differenz im Integrand oben. Der führende Beitrag kommt vom Gebiet $\epsilon/k_B T \ll 1$. Somit haben wir

$$\frac{1}{\mathrm{e}^{\beta(\epsilon-\mu)}-1} - \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta\epsilon}-1} \simeq k_B T\left(\frac{1}{\epsilon-\mu} - \frac{1}{\epsilon}\right) = \mu k_B T \frac{1}{\epsilon(\epsilon+|\mu|)} \,. \tag{5.41}$$

Dies führt zu

$$\begin{aligned}
(5.40) &\simeq \frac{V}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\mu k_B T\int_0^\infty \mathrm{d}\epsilon \frac{1}{\epsilon^{1/2}(\epsilon+|\mu|)} \\
&\simeq -\frac{V}{4\pi}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} k_B T_0 |\mu|^{1/2} \,,
\end{aligned} \tag{5.42}$$

wobei wir für das Integral das Ergebnis

$$\int_0^\infty \mathrm{d}\epsilon \frac{1}{\epsilon^{1/2}(\epsilon+|\mu|)} = \frac{\pi}{|\mu|^{1/2}} \tag{5.43}$$

eingesetzt haben und in der zweiten Zeile in (5.42) T durch T_0 ersetzt haben, da wir in niedrigster Ordnung arbeiten. Mit Hilfe von Gl. (5.39) und (5.42) haben wir

$$|\mu|^{1/2} \simeq -4\pi\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{-3/2}\frac{1}{k_B T_0}\frac{N}{V}\left[1-\left(\frac{T}{T_0}\right)^{3/2}\right] \,. \tag{5.44}$$

Auf der anderen Seite haben wir N/V aus Gl. (5.24) für $T = T_0$, so dass schließlich

$$\mu = -\left[\frac{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)\,\zeta\left(\frac{3}{2}\right)}{\pi}\right]^2 k_B T_0\left[\left(\frac{T}{T_0}\right)^{3/2} - 1\right]^2 \tag{5.45}$$

für $T \gtrsim T_0$. Das chemische Potential verschwindet kontinuierlich für $T \rightarrow T_0$. Jedoch zeigt die zweite Ableitung einen Sprung.

$$\frac{\partial^2 \mu}{\partial T^2} = \begin{cases} 0 & T < T_0 \, , \\ -\frac{9}{2}\left[\frac{\Gamma(3/2)\zeta(3/2)}{\pi}\right]^2 \frac{k_B}{T_0} & T > T_0 \, . \end{cases} \tag{5.46}$$

Dies deutet auf einen Phasenübergang hin, wobei T_0 zwei Gebiete mit verschiedenen physikalischen Eigenschaften trennt. In der Tat zeigt die spezifische Wärme eine Unstetigkeit in der Ableitung, ein Zeichen für einen Phasenübergang erster Ordnung (siehe Kerson Huang, *Statistical Mechanics*, Wiley & Sons, (1987), Abs. 12.3 oder Fetter-Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems*, McGraw-Hill, (1971), Kap. 2, Abs. 5).

5.3 Schwach wechselwirkendes Bosegas. Suprafluidität

Nachdem wir das ideale Bosegas betrachtet haben, stellt sich die Frage inwiefern eine solche Idealisierung im wechselwirkenden Fall gültig bleibt (analog zum Fall der Fermionen). Hier diskutieren wir den Fall eines schwach wechselwirkenden Bosegases.

Der Hamiltonoperator eines Systems mit Zweiteilchen-Wechselwirkungen hat die Form aus Abs. 3.4.3:

$$\begin{aligned} H &= \int \mathrm{d}\vec{x}\, \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\right) \hat{\psi}(\vec{x}) \\ &+\frac{1}{2}\int \mathrm{d}\vec{x}\,\mathrm{d}\vec{x}'\, \hat{\psi}^\dagger(\vec{x})\, \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}')\, V(|\vec{x}-\vec{x}'|)\, \hat{\psi}(\vec{x}')\, \hat{\psi}(\vec{x}) \, , \end{aligned} \tag{5.47}$$

wobei die Feldoperatoren Kommutationsbeziehungen für Bosonen erfüllen. In einem homogenen System mit periodischen Randbedingungen und Volumen V kann man die Feldopertoren wie folgt ausdrücken:

$$\hat{\psi}(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} \mathrm{e}^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}\, b_{\vec{k}} \, . \tag{5.48}$$

Dadurch erhält der Hamiltonoperator die folgende Form.

$$H = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} b^\dagger_{\vec{k}} b_{\vec{k}} + \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k},\vec{k}',\vec{q}} \tilde{V}(\vec{q})\, b^\dagger_{\vec{k}+\vec{q}} b^\dagger_{\vec{k}'-\vec{q}} b_{\vec{k}'} b_{\vec{k}} \, . \tag{5.49}$$

Da $\tilde{V} = \tilde{V}(|\vec{r}|)$, haben wir nach der Fourier-Transformation $\tilde{V}(\vec{q}) = \tilde{V}(-\vec{q})$.

Bei tiefer Temperaturen und mit der Annahme, dass die Wechselwirkung schwach ist, erwarten wir, dass ein endlicher Anteil der Teilchen sich im Zustand mit tiefster

Energie ($\vec{k} = 0$) befindet. Sei die Anzahl der Teilchen in diesem Zustand $N_0 \gg 1$. Für bosonische Operatoren haben wir

$$\begin{aligned} b_0^\dagger b_0 |N_0, \dots\rangle &= N_0 |N_0, \dots\rangle \,, \\ b_0 b_0^\dagger |N_0, \dots\rangle &= (N_0 + 1) |N_0, \dots\rangle \\ &\simeq N_0 |N_0, \dots\rangle \,, \end{aligned} \tag{5.50}$$

Die letzte Zeile oben impliziert, dass im thermodynamischen Limes die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für den Zustand $\vec{k} = 0$ miteinander kommutieren,

$$\left[b_0, b_0^\dagger \right] \stackrel{N \to \infty}{\longrightarrow} 0 \,, \tag{5.51}$$

so dass sie sich wie C-Zahlen verhalten. In der Tat,

$$\begin{aligned} b_0 |N_0, \dots\rangle &= \sqrt{N_0} |N_0 - 1, \dots\rangle \\ &\simeq \sqrt{N_0} |N_0, \dots\rangle \,, \\ b_0^\dagger |N_0, \dots\rangle &= \sqrt{N_0 + 1} |N_0 + 1, \dots\rangle \\ &\simeq \sqrt{N_0} |N_0, \dots\rangle \,, \end{aligned} \tag{5.52}$$

so dass sie wie folgt ersetzt werden können: b_0, $b_0^\dagger \to \sqrt{N_0}$.

Im Folgenden diskutieren wir, wie die verschiedenen Terme im Hamiltonoperator sich beim Ersetzen der Operatoren b_0 und $b_0^\dagger$ durch $\sqrt{N_0}$ verhalten. Beim kinetischen Term brauchen wir den Zustand $\vec{k} = 0$ nicht zu berücksichtigen.

$$\sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}} = \sum_{\vec{k}}{}' \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}} \,, \tag{5.53}$$

wobei $\sum_{\vec{k}}'$ eine Summe darstellt, bei der $\vec{k} = 0$ nicht mitgenommen wird. Für die Wechselwirkung in Gl. (5.49) haben wir verschiedene Möglichkeiten mit $\vec{k} = 0$.

i) Alle Impulse sind Null. Dieser Term liefert einen Beitrag

$$\frac{\tilde{V}(0) N_0^2}{2V} \,. \tag{5.54}$$

ii) Drei Impulse sind Null. Aufgrund von Impulserhaltung kann dieser Fall nicht auftreten.

iii) Zwei Impulse sind Null. Solche Terme geben einen Beitrag $\sim N_0$. Es gibt insgesamt $\binom{4}{2} = 6$ Fälle. Sie können wie folgt zusammengefasst werden:

$$\frac{N_0}{2V} \left\{ 2 \sum_{\vec{k}}{}' \left[\tilde{V}\left(0\right) + \tilde{V}\left(\vec{k}\right) \right] b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}}{}' \tilde{V}\left(\vec{k}\right) \left(b_{\vec{k}}^\dagger b_{-\vec{k}}^\dagger + b_{\vec{k}} b_{-\vec{k}} \right) \right\} \,. \tag{5.55}$$

iv) Nur ein Impuls ist Null. Solche Terme sind von der Ordnung $\mathcal{O}\left(N_0^{1/2}\right)$. Im thermodynamischen Limes können sie vernachlässigt werden.

Die Anzahl der Teilchen im tiefsten Zustand N_0 muß noch bestimmt werden. Da die Gesamtanzahl der Teilchen N ist, muß folgendes gelten.

$$N = N_0 + \sum_{\vec{k}}{}' b^\dagger_{\vec{k}} b_{\vec{k}} \,. \tag{5.56}$$

Somit haben wir

$$N_0^2 = N^2 - 2N \sum_{\vec{k}}{}' b^\dagger_{\vec{k}} b_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k},\vec{k}'}{}' b^\dagger_{\vec{k}} b_{\vec{k}} b^\dagger_{\vec{k}'} b_{\vec{k}'} \,. \tag{5.57}$$

Wir beschränken uns auf die Situation, in der $N - N_0 \ll N$. D.h. wir nehmen an, dass sich nur sehr wenige Teilchen außerhalb des Kondensats befinden, so dass der letzte Term oben vernachlässigt werden kann. Schließlich haben wir

$$\begin{aligned} H \simeq & \sum_{\vec{k}}{}' \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} b^\dagger_{\vec{k}} b_{\vec{k}} + \frac{\tilde{V}(0) N^2}{2V} \\ & + \frac{N}{V} \sum_{\vec{k}}{}' \tilde{V}\left(\vec{k}\right) b^\dagger_{\vec{k}} b_{\vec{k}} + \frac{N}{2V} \sum_{\vec{k}}{}' \tilde{V}\left(\vec{k}\right) \left(b^\dagger_{\vec{k}} b^\dagger_{-\vec{k}} + b_{\vec{k}} b_{-\vec{k}} \right) \,, \end{aligned} \tag{5.58}$$

wobei Terme, die mehr als zwei Operatoren mit $\vec{k} \neq 0$ enthalten, aus den oben genannten Gründen vernachlässigt wurden. Genauso haben wir N_0 durch N ersetzt.

Der genährte Hamiltonoperator hat Terme $b^\dagger_{\vec{k}} b^\dagger_{-\vec{k}}$ und $b_{\vec{k}} b_{-\vec{k}}$, wodurch die Teilchenzahl nicht mehr erhalten wird. Dies bedeutet, dass wir bei tiefen Temperaturen eine Phase annehmen, bei der ein Erhaltungssatz, der vom ursprünglichen System erfüllt wird, nicht mehr respektiert wird. I.A. entsprechen Erhaltungssätze Symmetrien. Unsere Annahme impliziert, dass eine bestimmte Symmetrie in der Tieftemperaturphase gebrochen wird (spontane Symmetriebrechung). Dies resultiert aus unserer Näherung für die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für $\vec{k} = 0$, welche zum Erwartungswert $\langle b_0 \rangle = \sqrt{N_0}$ führt. Dadurch wird eine U(1)-Symmetrie gebrochen, welche der ursprüngliche Hamiltonoperator hatte. Er war invariant gengenüber einer globalen Transformation der Phase

$$b_{\vec{k}} \rightarrow \mathrm{e}^{i\varphi} b_{\vec{k}} \,. \tag{5.59}$$

Dadurch, dass $\langle b_0 \rangle = \sqrt{N_0}$ ist, ist der Zustand nicht mehr invariant unter diese Transformation.

Der Hamiltonoperator in Gl. (5.58) ist bilinear in den Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren. Im Folgenden Abschnitt werden wir sehen, dass er mittels einer kanonischen Transformation diagonalisiert werden kann.

5.3.1 Die Bogoliubov-Transformation

Eine kanonische Transformation ist eine, welche die kanonischen Kommutationsbeziehungen erhält (wie in der klassischen Mechanik).

Wir führen neue Erzeugungs- und Vernichtugnsoperatoren wie folgt ein.

$$b_{\vec{k}} = u_{\vec{k}}\beta_{\vec{k}} - v_{\vec{k}}\beta^{\dagger}_{-\vec{k}} \ , \qquad b^{\dagger}_{\vec{k}} = u_{\vec{k}}\beta^{\dagger}_{\vec{k}} - v_{\vec{k}}\beta_{-\vec{k}} \ , \tag{5.60}$$

wobei wir $u_{\vec{k}}$, $v_{\vec{k}} \in \mathbb{R}$ und $u_{\vec{k}} = u_{-\vec{k}}$ bzw. $v_{\vec{k}} = v_{-\vec{k}}$ annehmen.

Wenn wir verlangen, dass die ursprünglichen und die neuen Operatoren kanonische Kommutationsbeziehungen für Bosonen erfüllen, muß die folgende Bedingung für die Koeffizienten gelten:

$$u^2_{\vec{k}} - v^2_{\vec{k}} = 1 \ . \tag{5.61}$$

Nach Einsetzen der Beziehungen (5.60) in den Hamiltonoperator (5.58), erhält man eine diagonale Form, falls

$$\left[\epsilon_{\vec{k}} + \rho\tilde{V}\left(\vec{k}\right)\right] u_{\vec{k}}v_{\vec{k}} = \rho\tilde{V}\left(\vec{k}\right)\left(u^2_{\vec{k}} + v^2_{\vec{k}}\right) \tag{5.62}$$

gilt, wobei $\epsilon_{\vec{k}} = \hbar^2\vec{k}^2/2m$ und $\rho \equiv N/V$ definiert wurden. Mit Hilfe dieser Gleichung und (5.61) können wir $u_{\vec{k}}$ und $v_{\vec{k}}$ eindeutig bestimmen. Insbesondere wird die Beziehung (5.61) durch hyperbolische Funktionen erfüllt:

$$u_{\vec{k}} = \cosh\varphi_{\vec{k}} \ , \quad v_{\vec{k}} = \sinh\varphi_{\vec{k}} \ . \tag{5.63}$$

Da für hyperbolischen Funktionen folgendes gilt,

$$\begin{aligned} \cosh^2\varphi &= \frac{1}{2}\left[\cosh(2\varphi) + 1\right] \ , \\ \sinh^2\varphi &= \frac{1}{2}\left[\cosh(2\varphi) - 1\right] \ , \\ 2\cosh\varphi\sinh\varphi &= \sinh(2\varphi) \ , \end{aligned} \tag{5.64}$$

haben wir

$$\tanh(2\varphi_{\vec{k}}) = \frac{\rho\tilde{V}\left(\vec{k}\right)}{\epsilon_{\vec{k}} + \rho\tilde{V}\left(\vec{k}\right)} \ . \tag{5.65}$$

Da $-1 \leq \tanh(x) \leq 1$ für $x \in [-\infty, \infty]$, muß die Wechselwirkung so sein, dass

$$\frac{\rho\left|\tilde{V}\left(\vec{k}\right)\right|}{\epsilon_{\vec{k}} + \rho\left|\tilde{V}\left(\vec{k}\right)\right|} \leq 1 \tag{5.66}$$

gilt. Dies ist der Fall falls $\tilde{V}(\vec{k}) > 0 \; \forall \; \vec{k}$. Im Fall $\tilde{V}(\vec{k}) = g$, mit g konstant ($\tilde{V}(\vec{x}) = g\delta(\vec{x})$) bedeutet dies, dass $g > 0$ ist, d.h. es handelt sich um ein repulsives Potential.

Mit Hilfe der Beziehung $1 - \tanh^2 x = 1/\cosh^2 x$, erhalten wir

$$\cosh(2\varphi_{\vec{k}}) = \frac{\epsilon_{\vec{k}} + \rho\tilde{V}(\vec{k})}{E_{\vec{k}}} \; , \tag{5.67}$$

mit

$$E_{\vec{k}} = \sqrt{\left[\epsilon_{\vec{k}} + \rho\tilde{V}(\vec{k})\right]^2 - \rho^2\tilde{V}^2(\vec{k})} \; . \tag{5.68}$$

Damit können wir schließlich $u_{\vec{k}}$ und $v_{\vec{k}}$ bestimmen:

$$\begin{aligned} u_{\vec{k}}^2 &= \frac{1}{2}\left[\frac{\epsilon_{\vec{k}} + \rho\tilde{V}(\vec{k})}{E_{\vec{k}}} + 1\right] \; , \\ v_{\vec{k}}^2 &= \frac{1}{2}\left[\frac{\epsilon_{\vec{k}} + \rho\tilde{V}(\vec{k})}{E_{\vec{k}}} - 1\right] \; , \end{aligned} \tag{5.69}$$

so dass

$$\begin{aligned} u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2 &= \frac{\epsilon_{\vec{k}} + \rho\tilde{V}(\vec{k})}{E_{\vec{k}}} \; , \\ 2u_{\vec{k}}v_{\vec{k}} &= \frac{\rho\tilde{V}(\vec{k})}{E_{\vec{k}}} \; . \end{aligned} \tag{5.70}$$

Mit diesen Ergebnissen erhalten wir die folgende Form für den Hamiltonoperator:

$$H = \frac{\rho N\tilde{V}(0)}{2} - \frac{1}{2}\sum_{\vec{k}}{}' \left[\epsilon_{\vec{k}} + \rho\tilde{V}(\vec{k}) - E_{\vec{k}}\right] + \sum_{\vec{k}}{}' E_{\vec{k}}\beta_{\vec{k}}^\dagger\beta_{\vec{k}} \; . \tag{5.71}$$

Da die transformierten Operatoren bosonische Beziehungen erfüllen, ist der Grundzustand durch das Vakuum dieser Operatoren gegeben, d.h. durch den Zustand, bei dem

$$\beta_{\vec{k}}|0\rangle = 0 \quad \forall \; \vec{k} \neq 0 \tag{5.72}$$

gilt. Dieses ist das Vakuum der neuen Quasiteilchen.

Die Grundzustandsenergie ist

$$E_0 = \langle 0|H|0\rangle = \frac{\rho N\tilde{V}(0)}{2} - \frac{1}{2}\sum_{\vec{k}}{}' \left[\epsilon_{\vec{k}} + \rho\tilde{V}(\vec{k}) - E_{\vec{k}}\right] \; . \tag{5.73}$$

Die angeregten Zustände sind Zustände von nichtwechselwirkenden Bosonen mit Energie $E_{\vec{k}}$. Im Limes großer Wellenlängen haben wir

$$E_{\vec{k}} \to \left[\frac{\rho \tilde{V}(\vec{k} \to 0)}{m} \right]^{1/2} \hbar |\vec{k}| \ . \tag{5.74}$$

Die lineare Dispersion entspricht Dichteschwingungen der Teilchen ausserhalb des Kondensats, d.h. Phononen. Der Vorfaktor ist die Schallgeschwindigkeit.

Schließlich diskutieren wir die Suprafluidität. Dazu betrachten wir die Bewegung eines makroskopischen Objekts mit Masse M und Geschwindigkeit $\vec{v}$ durch das Bosonen-System bei Temperatur $T = 0$. Impuls und Energie des makroskopischen Objekts sind

$$\vec{P} = M\vec{v} \ , \qquad E = \frac{1}{2} M \vec{v}^2 \ . \tag{5.75}$$

Dissipation tritt auf, wenn das makroskopische Objekt Energie und Impuls an die Anregungen des Systems gibt. Bei $T = 0$, d.h. im Grundzustand des Systems, kann dies nur durch Erzeugung von Quasiteilchen geschehen. Falls das makroskopische Objekt ein Quasiteilchen mit Impuls $\vec{k}$ und Energie $E_{\vec{k}}$ anregt, muß die Geschwindigkeit der Impulserhaltung entsprechend geändert werden:

$$\vec{v}' = \vec{v} - \frac{\vec{k}}{M} \ . \tag{5.76}$$

Dementsprechend ist die neue Energie

$$E' \ = \ \frac{1}{2} M \vec{v}'^2 \simeq E - \vec{k} \cdot \vec{v} \ , \tag{5.77}$$

wobei wir aufgrund der großen Masse M den quadratischen Term vernachlässigt haben. Andererseits, muß wegen Energieerhaltung gelten, dass

$$E - E' = E_{\vec{k}} \ . \tag{5.78}$$

Dies bedeutet, dass Energieerhaltung nur erfüllt werden kann, wenn $|\vec{v}|$ die Schallgeschwindigkeit erreicht. Für kleinere Geschwindigkeiten kann die Energie nicht dissipiert werden. Im nichtwechselwirkenden Fall hingegen ist die Dispersionsrelation der Anregungen quadratisch. Somit kann immer Energie an das bosonische System abgegeben werden. Wir sehen also, dass die Wechselwirkung die physikalischen Eigenschaften der Bosonen drastisch verändert.