II.8. Wechselwirkende Bosonen

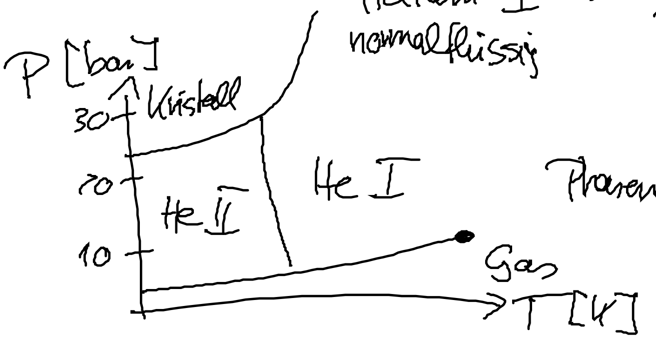
1) Hintergrund

Bisher: wechselwirkungsfreie Bosonen (z.B. Photonen)
Bose-Einstein (BE) Kondensation

(Frühe) Motivation, sich mit wechselwirkenden Bosonen zu beschäftigen: „Lambda-Übergang" in Helium 4

Helium 4:
- besteht aus 2 Protonen und 2 Elektronen $\rightarrow$ 4 Fermionen
  effektives Boson
- Im Unterschied zu anderen atomaren Bosonen bleibt Helium 4 flüssig (bei vielen Drücken) bei Abkühlung bis auf $T \to 0$
- Bei $T = 2.18\,K$ tritt ein Übergang in eine suprafluide Phase
  ⇕ reibungsfreie Strömung $\Leftrightarrow$ Viskosität $\eta \to 0$
  Entdeckung durch Kapitsa, Allen, Misener
  1937

Man spricht häufig vom Übergang
Helium I $\longrightarrow$ Helium II
normalflüssig   suprafüssig



Phasendiagramm

Frage: Zusammenhang mit BE-Kondensation ??

Man findet:
Das Modell wechselwirkungsfreier Bosonen reicht nicht aus, um den Übergang He I → He II zu beschreiben!!

Wichtiger Indikator:

Helium II: $C_V \propto T^3$ (wie bei Phononen (Gitterschwingungen) im Festkörper)

Ideales Bose-Gas: $C_V \propto T^{3/2}$

(C_V: Wärmekapazität, $C_V = \left.\frac{\partial E}{\partial T}\right|_V$

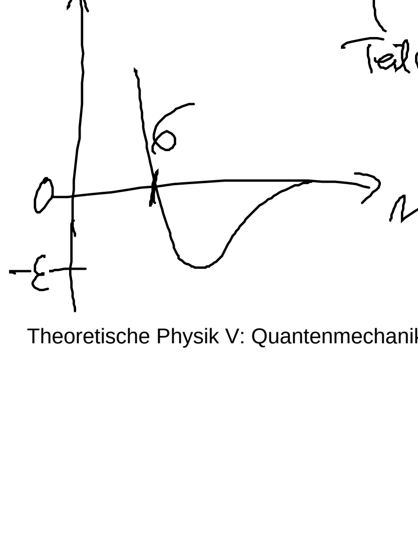
Vermutung:

In Helium II gibt es (aufgrund von Wechselwirkungen) kollektive Anregungen ⟺ Quasiteilchen!

Form der Wechselwirkung zwischen realen Helium-4-Atomen:
näherungsweise Lennard-Jones-Potential

$$\underbrace{V(r)}_{\text{Teilchenabstand}} = 4\varepsilon \left(\underbrace{\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12}}_{\substack{\text{Repulsion} \\ \text{(Pauli-Prinzip,} \\ \text{Nicht-Überlappbarkeit} \\ \text{der Elektronenhülle)}}} - \underbrace{\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}}_{\substack{\text{attraktiv (van-der-Waals} \\ \text{induzierte Dipol-Dipol-} \\ \text{Wechselwirkung)}}} \right)$$

σ: Durchmesser



2) Hamiltonian

Ausgangspunkt: Hamiltonian eines wechselwirkenden Bosonensystems (Teilchen mit Spin 0) in Impulsdarstellung (s. Kap. II. 4)

$$\hat{H} = \underbrace{\sum_{\underline{k}} \varepsilon_k a_{\underline{k}}^+ a_{\underline{k}}}_{\substack{\text{Einteilchenterm,} \\ \varepsilon_k = \hbar^2 k^2/2m}} + \frac{1}{2V} \sum_{\tilde{\underline{k}}} \sum_{\underline{k}} \sum_{\underline{q}} \tilde{V}_{\tilde{\underline{k}}} \hat{a}_{\underline{k}}^+ \hat{a}_{\underline{q}}^+ \hat{a}_{\underline{q}+\tilde{\underline{k}}} \hat{a}_{\underline{k}-\tilde{\underline{k}}}$$

Volumen

mit $\tilde{V}_{\tilde{\underline{k}}} = \int d\underline{R}\, e^{i\tilde{\underline{k}}\cdot\underline{R}}\, V(\underline{R})$

Wechselwirkungspotential

setze $\underline{q} = \underline{k} - \tilde{\underline{k}}$

$$\boxed{\hat{H} = \sum_{\underline{k}} \varepsilon_k a_{\underline{k}}^+ \hat{a}_{\underline{k}} + \frac{1}{2V} \sum_{\tilde{\underline{k}}} \sum_{\underline{k}} \sum_{\underline{q}} \tilde{V}_{\tilde{\underline{k}}} \hat{a}_{\underline{q}+\tilde{\underline{k}}}^+ \hat{a}_{\underline{k}-\tilde{\underline{k}}}^+ \hat{a}_{\underline{k}} \hat{a}_{\underline{q}}} \quad (*)$$

(bosonischer Charakter steckt in den Vertauschungsrelationen !!)

Wir nehmen nun an:

Bei sehr tiefen Temperaturen findet (wie beim idealen Bosegas) eine makroskopische Besetzung des Grundzustands statt!
$(\underline{k}=0)$
$\varepsilon_{\underline{k}=0} = \varepsilon_0 = 0$

$\Rightarrow N_0 \gg 1$ Bosonen besetzen den (Vielteilchen)-Zustand $|\Psi_{\underline{k}=0}\rangle^{(+)} = \underbrace{|\Psi_0\rangle}_{}{}_{N_0}$

$N_0 = O(N)$

Grundzustand mit N_0 Teilchen

$\Leftrightarrow N_0 = {}_{N_0}\langle \Psi_0 | \hat{a}^+_{\underline{k}=0} \hat{a}_{\underline{k}=0} | \Psi_0 \rangle_{N_0} \leq N$

Folgerung:

betrachte (übliche) Relation für Erzeuger/Vernichter

$$\hat{a}^+_{\underline{k}=0} |\Psi_0\rangle_{N_0} = \sqrt{N_0+1}\, |\Psi_0\rangle_{N_0+1}$$

$$\hat{a}_{\underline{k}=0} |\Psi_0\rangle_{N_0} = \sqrt{N_0}\, |\Psi_0\rangle_{N_0-1}$$

Da $N_0 \gg 1$ können wir den Unterschied zwischen N_0 und N_0+1 vernachlässigen!

$$\Rightarrow \hat{a}^+_{\underline{k}=0} \hat{a}_{\underline{k}=0} |\Psi_0\rangle_{N_0} = \hat{a}_{\underline{k}=0} \hat{a}^+_{\underline{k}=0} |\Psi_0\rangle_{N_0}$$

$$= \hat{n}_{\underline{k}=0} |\Psi_0\rangle_{N_0} = N_0 |\Psi_0\rangle_{N_0}$$

Erzeuger und Vernichter vertauschen, werden effektiv durch Zahlen genähert

$$\hat{a}_{\underline{k}=0} = \hat{a}^+_{\underline{k}=0} = \sqrt{N_0}$$

~~Bogoliub~~ "Bogoliubov-Vorschrift"

gilt nur für $\underline{k}=0$, also für den Grundzustand!

Folgerungen für $\hat{H}$?

Identifiziere zunächst in $\hat{H}$ Terme von der Ordnung N_0 (da $N_0 \gg 1$, sollten diese Terme dominant sein)!

Einteilchenterm in $\hat{H}$ $\quad \underbrace{\hat{a}^+_{\underline{k}=0}\hat{a}_{\underline{k}=0}}$ $\quad \cancel{\frac{\hbar^2 k^2}{2m}}$

$$\sum_{\underline{k}} \varepsilon_k \hat{a}^+_{\underline{k}} \hat{a}_{\underline{k}} = \cancel{\varepsilon_0 \hat{a}^+_0 \hat{a}_0} + \sum_{\underline{k}\neq 0} \varepsilon_k \hat{a}^+_{\underline{k}} \hat{a}_{\underline{k}}$$

$$= \sum_{\underline{k}\neq 0} \varepsilon_k \hat{a}^+_{\underline{k}} \hat{a}_{\underline{k}}$$

Zweiteilchenterm:

enthält Summen über $\hat{a}^+_{\underline{q}+\underline{\tilde{k}}}\, \hat{a}^+_{\underline{k}-\underline{\tilde{k}}}\, \hat{a}_{\underline{k}}\, \hat{a}_{\underline{q}}\, \hat{V}_{\underline{\tilde{k}}}$

betrachte nun Terme mit verschwindenden Wellenvektoren!

~~(dann~~

$\underline{k}=\underline{q}=\underline{\tilde{k}}=0$: $\hat{V}_0 \hat{a}^+_0 \hat{a}^+_0 \hat{a}_0 \hat{a}_0 = \hat{V}_0 N_0^2$

Fouriertransformierte bei $k=0$

(1) $\underline{k}=\underline{q}=0,\ \underline{\tilde{k}}\neq 0$: $\hat{V}_{\underline{\tilde{k}}}\, \hat{a}^+_{\underline{\tilde{k}}}\, \hat{a}^+_{-\underline{\tilde{k}}}\, N_0$

(2) $\underline{k}=-\underline{q}=\underline{\tilde{k}}$: $\hat{V}_{\underline{\tilde{k}}}\, \hat{a}^+_0 \hat{a}^+_0\, \hat{a}_{\underline{\tilde{k}}}\, \hat{a}_{-\underline{\tilde{k}}} = \hat{V}_{\underline{\tilde{k}}}\, \hat{a}_{\underline{\tilde{k}}}\, \hat{a}_{-\underline{\tilde{k}}}\, N_0$

③ $\underline{k}=\hat{\underline{k}}, q=0$: $\tilde{V}_{\hat{\underline{k}}}\, \hat{a}^+_{\hat{\underline{k}}}\, \hat{a}_{\hat{\underline{k}}}\, N_0$

④ $\underline{k}=\hat{\underline{k}}=0, q\neq 0$: $\tilde{V}_0\, \hat{a}^+_{\underline{q}}\, \hat{a}_{\underline{q}}\, N_0$

⑤ $\hat{\underline{k}}=q=0, \underline{k}\neq 0$: $\tilde{V}_0\, \hat{a}^+_{\underline{k}}\, \hat{a}_{\underline{k}}\, N_0$

⑥ $\hat{\underline{k}}+q=0, \underline{k}=0$: $\tilde{V}_{\hat{\underline{k}}}\, \hat{a}^+_{-\hat{\underline{k}}}\, \hat{a}_{-\hat{\underline{k}}}\, N_0$

Es gibt also 6 Terme, die linear in N_0 sind, und einen Term $\sim N_0^2$

Alle anderen Terme enthalten entweder nur einen oder gar keinen Erzeuger/Vernichter bei $\underline{k}=0$

$\Rightarrow$ diese Terme sind Terme $\mathcal{O}(\sqrt{N_0})+\mathcal{O}(1)$

Wir vernachlässigen diese Terme gegenüber den dominanten Termen $\mathcal{O}(N_0)$ oder $\mathcal{O}(N_0^2)$!!

(denn $N_0 \gg 1$)

Dies ergibt den effektiven Hamiltonian (aus ⊛)

$$H_{eff}=\sum_{\underline{k}\neq 0}\varepsilon_k\, \hat{a}^+_{\underline{k}} a_{\underline{k}} + \frac{1}{2V} N_0^2 \tilde{V}_0$$

$$+\frac{N_0}{2V}\Big(\sum_{\underline{k}\neq 0}\underbrace{\tilde{V}_{\underline{k}}\,\hat{a}^+_{\underline{k}}\hat{a}_{\underline{k}}}_{3} + \sum_{\underline{k}\neq 0}\underbrace{\tilde{V}_{\underline{k}}\,\hat{a}^+_{-\underline{k}}\hat{a}_{-\underline{k}}}_{6}\Big)$$

$$+\frac{N_0}{2V}\Big(\sum_{\underline{k}\neq 0}\underbrace{\tilde{V}_0\,\hat{a}^+_{\underline{k}}\hat{a}_{\underline{k}}}_{5} + \sum_{\underline{q}\neq 0}\underbrace{\tilde{V}_0\,\hat{a}^+_{\underline{q}}\hat{a}_{\underline{q}}}_{4}\Big)$$

$$+\frac{N_0}{2V}\Big(\sum_{\underline{k}\neq 0}\underbrace{\tilde{V}_{\underline{k}}\,\hat{a}^+_{\underline{k}}\hat{a}^+_{-\underline{k}}}_{1} + \sum_{\underline{k}\neq 0}\underbrace{\tilde{V}_{\underline{k}}\,\hat{a}_{\underline{k}}\hat{a}_{-\underline{k}}}_{2}\Big)$$

Zusammenfassen der Terme, die sich nur durch Indizes unterscheiden

$$\Rightarrow \boxed{\begin{aligned}\hat{H}_{\text{eff}} &= \sum_{\underline{k}\neq 0}\Big(\varepsilon_{\underline{k}} + \frac{N_0}{V}\tilde{V}_0 + \frac{N_0}{V}\tilde{V}_{\underline{k}}\Big)\underbrace{\hat{a}^+_{\underline{k}}\hat{a}_{\underline{k}}}_{\hat{n}_{\underline{k}}} \\ &+ \frac{N_0^2\tilde{V}_0}{2V} \\ &+ \sum_{\underline{k}\neq 0}\frac{N_0\tilde{V}_{\underline{k}}}{2V}\Big(\hat{a}^+_{\underline{k}}\hat{a}^+_{-\underline{k}} + \hat{a}_{\underline{k}}\hat{a}_{-\underline{k}}\Big)\end{aligned}}$$

Effektiver Hamiltonian bei makroskopischer Besetzung des Grundzustands ($N_0 \gg 1$)

Interpretation der Terme

- Erster Term: effektiver Einteilchenterm mit renormierter Einteilchenenergie

$$\tilde{\varepsilon}_{\underline{k}} \equiv \varepsilon_{k} + \frac{N_0}{V}\Big(\underbrace{\tilde{V}_0 + \tilde{V}_{\underline{k}}}_{\text{Wechselwirkung}}\Big)$$

- Zweiter Term: Konstante, abhängig von der Dichte des "Kondensats" $\left(\frac{N_0}{V}\right)$ und vom Raumintegral über das Wechselwirkungspotential $\tilde{V}_0 = \int d\underline{R}\, V(\underline{R})$

- Dritter Term: Unbekannte Form, da Paare von zwei Erzeugern bzw. zwei Vernichtern!

Zur weiteren Behandlung soll H_{eff} insgesamt in Einteilchenform gebracht werden!
Suche also Darstellung in der Form ("Diagonalisierung")

$$H_{eff} = \sum_{\underline{k}\neq 0} \omega_{\underline{k}}\, \alpha^{+}_{\underline{k}} \alpha_{\underline{k}}$$

neue Erzeuger/Vernichter

Strategie: "Bogoliubov-Transformation"

3) Bogoliubov-Transformation (s. z.B. Schwabl)

Ansatz ($\underline{k} \neq 0$)

(*) $$\hat{a}_{\underline{k}} = u_{\underline{k}} \hat{\alpha}_{\underline{k}} + v_{\underline{k}} \hat{\alpha}^+_{-\underline{k}}$$ mit $u_{\underline{k}}, v_{\underline{k}} \in \mathbb{R}$

$$\hat{a}^+_{\underline{k}} = u_{\underline{k}} \hat{\alpha}^+_{\underline{k}} + v_{\underline{k}} \hat{\alpha}_{-\underline{k}}$$ und $u_{\underline{k}} = u_{-\underline{k}}$, $v_{\underline{k}} = v_{-\underline{k}}$

Die Operatoren $\hat{\alpha}^+_{\underline{k}}$, $\hat{\alpha}_{\underline{k}}$ sind die neuen Erzeuger und Vernichter, die aber erst noch bestimmt werden müssen!

Fordere zunächst: $\hat{\alpha}_{\underline{k}}$, $\hat{\alpha}^+_{\underline{k}}$ erfüllen die üblichen Bosonen-Vertauschungsrelation

$$[\hat{\alpha}_{\underline{k}}, \hat{\alpha}_{\underline{k}'}] = 0 \qquad [\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

$$[\hat{\alpha}^+_{\underline{k}}, \hat{\alpha}^+_{\underline{k}'}] = 0$$

$$[\hat{\alpha}_{\underline{k}}, \hat{\alpha}^+_{\underline{k}'}] = \delta_{\underline{k},\underline{k}'}$$

Das ist erfüllt, wenn $u_{\underline{k}}^2 - v_{\underline{k}}^2 = 1$
(hier ohne Beweis)

Schreibe nun den Hamiltonian $\hat{H}_{eff}$ mit dem Ansatz (*) um

$$\hat{a}^+_{\underline{k}} \hat{a}_{\underline{k}} = \hat{n}_{\underline{k}} \overset{(*)}{=} u_{\underline{k}}^2 \hat{\alpha}^+_{\underline{k}} \hat{\alpha}_{\underline{k}} + v_{\underline{k}}^2 \hat{\alpha}_{-\underline{k}} \hat{\alpha}^+_{-\underline{k}} + u_{\underline{k}} v_{\underline{k}} \left(\hat{\alpha}^+_{\underline{k}} \hat{\alpha}^+_{-\underline{k}} + \hat{\alpha}_{\underline{k}} \hat{\alpha}_{-\underline{k}} \right)$$

$$\hat{a}^+_{\underline{k}}\hat{a}^+_{-\underline{k}} = u_{\underline{k}}^2 \hat{\alpha}^+_{\underline{k}}\hat{\alpha}^+_{-\underline{k}} + v_{\underline{k}}^2 \hat{\alpha}_{\underline{k}}\hat{\alpha}_{-\underline{k}} + u_{\underline{k}} v_{\underline{k}} (\hat{\alpha}^+_{\underline{k}}\hat{\alpha}_{\underline{k}} + \hat{\alpha}_{-\underline{k}}\hat{\alpha}^+_{-\underline{k}})$$

$$\hat{a}_{\underline{k}}\hat{a}_{-\underline{k}} = u_{\underline{k}}^2 \hat{\alpha}_{\underline{k}}\hat{\alpha}_{-\underline{k}} + v_{\underline{k}}^2 \hat{\alpha}^+_{\underline{k}}\hat{\alpha}^+_{-\underline{k}} + u_{\underline{k}} v_{\underline{k}} (\hat{\alpha}^+_{-\underline{k}}\hat{\alpha}_{-\underline{k}} + \hat{\alpha}_{\underline{k}}\hat{\alpha}^+_{\underline{k}})$$

$$\hat{H}_{eff} = \sum_{\underline{k}\neq 0} \tilde{\varepsilon}_{\underline{k}} \Big(u_{\underline{k}}^2 \hat{\alpha}^+_{\underline{k}}\hat{\alpha}_{\underline{k}} + v_{\underline{k}}^2 \overbrace{\hat{\alpha}_{-\underline{k}}\hat{\alpha}^+_{-\underline{k}}}^{1+\hat{\alpha}^+_{-\underline{k}}\hat{\alpha}_{-\underline{k}}} + u_{\underline{k}} v_{\underline{k}} (\hat{\alpha}^+_{\underline{k}}\hat{\alpha}^+_{-\underline{k}} + \hat{\alpha}_{\underline{k}}\hat{\alpha}_{-\underline{k}}) \Big)$$

$$+ \frac{N_0^2 \tilde{V}_0}{2V}$$

$$+ \frac{N_0}{2V} \sum_{\underline{k}\neq 0} \tilde{V}_{\underline{k}} \Big((u_{\underline{k}}^2 + v_{\underline{k}}^2)(\hat{\alpha}^+_{\underline{k}}\hat{\alpha}^+_{-\underline{k}} + \hat{\alpha}_{\underline{k}}\hat{\alpha}_{-\underline{k}}) + 2 u_{\underline{k}} v_{\underline{k}} (\hat{\alpha}^+_{\underline{k}}\hat{\alpha}_{\underline{k}} + \hat{\alpha}_{\underline{k}}\hat{\alpha}^+_{\underline{k}}) \Big)$$

mit $\tilde{\varepsilon}_{\underline{k}} = \varepsilon_{\underline{k}} + \frac{N_0}{V}(\tilde{V}_0 + \tilde{V}_{\underline{k}})$

Ziel: Alle Terme, die nicht proportional zu $\hat{\alpha}^+_{\underline{k}}\hat{\alpha}_{\underline{k}}$ sind, sollen verschwinden!

$$\Leftrightarrow \tilde{\varepsilon}_{\underline{k}} u_{\underline{k}} v_{\underline{k}} (\hat{\alpha}^+_{\underline{k}}\hat{\alpha}^+_{-\underline{k}} + \hat{\alpha}_{\underline{k}}\hat{\alpha}_{-\underline{k}}) + \frac{N_0}{2V}\tilde{V}_{\underline{k}} (u_{\underline{k}}^2 + v_{\underline{k}}^2)(\hat{\alpha}^+_{\underline{k}}\hat{\alpha}^+_{-\underline{k}} + \hat{\alpha}_{\underline{k}}\hat{\alpha}_{-\underline{k}}) \stackrel{!}{=} 0$$

$$\Longleftrightarrow \boxed{\tilde{\varepsilon}_{\underline{k}}\, u_{\underline{k}} v_{\underline{k}} + \frac{N_0}{2V}\tilde{V}_{\underline{k}}\left(u_{\underline{k}}^2 + v_{\underline{k}}^2\right) \overset{!}{=} 0}$$

muß kombiniert werden mit $u_{\underline{k}}^2 - v_{\underline{k}}^2 = 1$

(Erfüllung der Vertauschungsrelation)

Man erhält:

$$u_{\underline{k}}^2 = \frac{\omega_{\underline{k}} + \tilde{\varepsilon}_{\underline{k}}}{2\omega_{\underline{k}}} \quad \text{mit} \quad \omega_{\underline{k}} = \sqrt{\tilde{\varepsilon}_{\underline{k}}^2 - \left(\frac{N_0}{V}\tilde{V}_{\underline{k}}\right)^2}$$

$$v_{\underline{k}}^2 = \frac{-\omega_{\underline{k}} + \tilde{\varepsilon}_{\underline{k}}}{2\omega_{\underline{k}}}, \quad u_{\underline{k}} v_{\underline{k}} = -\frac{N_0}{2V}\frac{\tilde{V}_{\underline{k}}}{\omega_{\underline{k}}}$$

Beachte: Es muß gelten $\tilde{\varepsilon}_{\underline{k}} > \frac{N_0}{V}\tilde{V}_{\underline{k}}$

da sonst $\omega_{\underline{k}}$ imaginär

Ergebnis für H_{eff} nach der Bogoliubov-Transformation

$$\boxed{H_{eff} = \sum_{\underline{k}\neq 0}\left(\omega_{\underline{k}}\left(\alpha_{\underline{k}}^{+}\alpha_{\underline{k}} + \frac{1}{2}\right) - \frac{1}{2}\left(\tilde{\varepsilon}_{\underline{k}} + \frac{N_0}{V}\left(\tilde{V}_0 + \tilde{V}_{\underline{k}}\right)\right)\right) + \frac{N_0^2}{2V}\tilde{V}_0}$$