Wh.: $\langle n_\alpha \rangle$ in einem "Gemisch", repräsentiert durch statist. Operator $\hat{\rho} = \frac{1}{Z_{GK}} e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})}$

großkanon. Ensemble $(\mu, T, V$ fest$)$

$\beta = \frac{1}{k_B T}$

$Z_{GK} = \mathrm{Tr}\, e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})}$ "Trace" (Spur)

(allg.: $\hat{\rho} = \sum_k p_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k|$) reine Zustände

$$\langle n_\alpha \rangle = \langle \hat{a}_\alpha^+ \hat{a}_\alpha \rangle = \mathrm{Tr}\, \hat{\rho}\, \hat{a}_\alpha^+ \hat{a}_\alpha$$

Mittelwertbildung im großkanon. Ensemble

$$= \frac{1}{Z_{GK}} \mathrm{Tr}\, e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} \hat{a}_\alpha^+ \hat{a}_\alpha$$

Baker-Hausdorff-Campbell Formel + Vertauschungsrelation der $\hat{a}_\alpha^+, \hat{a}_\alpha$

man findet (siehe letzte VL): $e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} \hat{a}_\alpha^+ \overset{\circledast}{=} e^{-\beta(\varepsilon_\alpha - \mu)} \hat{a}_\alpha^+ e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})}$

benutze $\hat{H} = \sum_\alpha \varepsilon_\alpha \hat{a}_\alpha^+ \hat{a}_\alpha$

Energieeigenwert

$$\hat{N} = \sum_\alpha \hat{n}_\alpha = \sum_\alpha \hat{a}_\alpha^+ \hat{a}_\alpha$$

Einsetzen in Ausdruck für $\langle n_\alpha \rangle$

$$\langle n_\alpha \rangle = \mathrm{Tr}\, \hat{\rho}\, \hat{a}_\alpha^+ \hat{a}_\alpha = \frac{1}{Z_{GK}} \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} \hat{a}_\alpha^+ \hat{a}_\alpha \right)$$

$$\overset{\circledast}{=} \frac{1}{Z_{GK}} \mathrm{Tr}\left(\underbrace{e^{-\beta(\varepsilon_\alpha - \mu)}}_{} \hat{a}_\alpha^+ e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} \hat{a}_\alpha \right)$$

Zahl: kann vor die Spur gezogen werden!

$$= \frac{1}{Z_{GK}} e^{-\beta(\varepsilon_\alpha - \mu)} \mathrm{Tr}\left(\hat{a}_\alpha^+ e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} \hat{a}_\alpha \right)$$

Zykl. Invarianz der Spur

$$\overset{\downarrow}{=} \frac{1}{Z_{GK}} e^{-\beta(\varepsilon_\alpha - \mu)} \mathrm{Tr}\left(\hat{a}_\alpha \hat{a}_\alpha^+ e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} \right)$$

bis hierhin galt alles für Fermionen und Bosonen!

$$= \frac{1}{Z_{GK}} e^{-\beta(\varepsilon_\alpha-\mu)} \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})} \hat{a}_\alpha \hat{a}_\alpha^+\right)$$

$$= e^{-\beta(\varepsilon_\alpha-\mu)} \mathrm{Tr}\Big(\hat{\rho} \underbrace{\hat{a}_\alpha \hat{a}_\alpha^+}_{1 \pm \hat{a}_\alpha^+ \hat{a}_\alpha}\Big)$$

benutze

$$\left[\hat{a}_\alpha, \hat{a}_\alpha^+\right]_\mp = 1$$

oberes Vorzeichen: Bosonen
unteres " : Fermion

$$= e^{-\beta(\varepsilon_\alpha-\mu)} \Big(\underbrace{\mathrm{Tr}\hat{\rho}}_{1} \pm \underbrace{\mathrm{Tr}\, \hat{\rho}\, \hat{a}_\alpha^+ \hat{a}_\alpha}_{\langle \hat{n}_\alpha \rangle}\Big)$$

$$= e^{-\beta(\varepsilon_\alpha-\mu)} \left(1 \pm \langle \hat{n}_\alpha \rangle\right)$$

Insgesamt:

$$\langle \hat{n}_\alpha \rangle = e^{-\beta(\varepsilon_\alpha-\mu)} \left(1 \pm \langle \hat{n}_\alpha \rangle\right)$$

Auflösen: $\langle \hat{n}_\alpha \rangle \left(1 \mp e^{-\beta(\varepsilon_\alpha-\mu)}\right) = e^{-\beta(\varepsilon_\alpha-\mu)}$

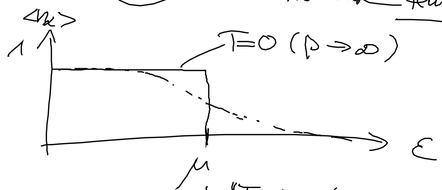
$$\Rightarrow \quad (**) \quad \boxed{\langle \hat{n}_\alpha \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_\alpha-\mu)} \mp 1}}$$

oberes Vorzeichen: Bosonen
unteres " : Fermion

Bose-Einstein bzw. Fermi-Dirac-Statistik!

Bemerkungen:

- Für Fermionen erhält man aus (**) die bekannte Fermifunktion.



Folge des Pauli-Prinzips!

• Für Bosonen

Kein Pauli-Prinzip!

Alle Bosonen können im selben Zustand sein!

Nenner in (**) kann null werden $\Longleftrightarrow$ $\langle n_k \rangle$ kann unendlich groß werden

$e^{\beta(\varepsilon_k-\mu)}-1$

"Bose-Einstein-Kondensation"

II.7 Exkurs: BE-Kondensation für wechselwirkungsfreie Bosonen

(BE = Bose-Einstein)

(VL Thermodynamik / Statist. Physik)

Was erwarten wir für tiefe T?

Vielteilchen-System will seine Energie minimieren! Bosonen besetzen also möglichst tiefe Energieniveaus

Wir erwarten also:

Für $T \to 0$ gehen immer mehr Teilchen in den Grundzustand

$$\underbrace{\langle \hat{n}_0 \rangle}_{\text{Besetzungszahl des Grundzustands}} \sim N \quad \text{für } T \to 0$$

(N: Gesamtteilchenzahl)

„makroskopische" Besetzung des Grundzustands!

BE-Kondensation: Zwischen der Hochtemperaturphase (Teilchen über die Energie-Zustände verteilt) und der Besetzung des Grundzustands findet eine Art Phasenübergang statt

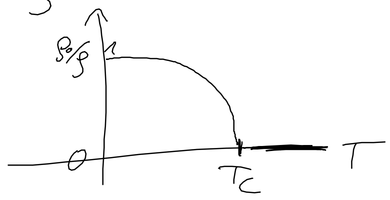
Charakteristiken: (für ideale, d.h. wechselwirkungsfreie Bosonensysteme)

$$\rho(T,\mu) = \begin{cases} \rho_n(T,\mu) = \lambda_T^{-3}\, \underbrace{g_{3/2}(z)}_{\text{Funktion von } T,\mu}, & T > T_c \\ \underbrace{\rho_0(T)}_{\text{Anteil des Kondensats, d.h. der Teilchen im Grundzustand}} + \underbrace{\rho_n(T,\mu=0)}_{\text{Anteil der Bosonen im angeregten Zustand}} & T < T_c \end{cases}$$

ρ: Teilchendichte $\frac{N}{V}$

λ_T: therm. Wellenlänge

mit $\frac{\rho_0(T)}{\rho} = 1 - \left(\frac{T}{T_C}\right)^{3/2}$ $\quad (\rho = \rho_0 + \rho_n)$



T_C bestimmt sich aus der Relation $\rho \lambda_T^3 \overset{!}{=} 2.612$

mit $\lambda_T = \sqrt{\frac{\hbar^2 2\pi}{m k_B T}}$

II.8. Wechselwirkende Bosonensysteme

Ausgangspunkt: Hamiltonian eines wechselwirkenden Bosonensystems in 2. Quantisierung mit Spin $s=0$ in Impulsdarstellung

(d.h. Einteilchenbasis aus ebenen Wellen im Volumen V)

$$\hat{H} = \underbrace{\sum_{\underline{k}} \varepsilon_{\underline{k}} \hat{a}^+_{\underline{k}} \hat{a}_{\underline{k}}}_{\text{Einteilchenanteil}} + \underbrace{\frac{1}{2V} \sum_{\underline{\tilde{k}}} \sum_{\underline{k}} \sum_{\underline{q}} \tilde{V}_{\underline{\tilde{k}}} \hat{a}^+_{\underline{k}} \hat{a}^+_{\underline{q}} \hat{a}_{\underline{q}+\underline{\tilde{k}}} \hat{a}_{\underline{k}-\underline{\tilde{k}}}}_{\text{Zweiteilchenanteil}}$$

mit $\varepsilon_{\underline{k}} = \varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

$\tilde{V}_{\underline{\tilde{k}}}$: Fouriertransformierte des Paarpotentials $U(\underline{r}_i - \underline{r}_j)$

typischerweise schreibt man die Summen um:

setze $\underline{q} = \underline{k} - \underline{\tilde{k}} \Rightarrow \underline{k} = \underline{q} + \underline{\tilde{k}}$ etc

das geht, weil alle Summen über alle möglichen Wellenvektoren (alle Richtungen) laufen!

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

Folgende Annahme:

Bei tiefen Temperaturen findet (wie beim idealen Bosegas!) eine makroskopische Besetzung des Grund~~zustands~~ statt, also des Zustands mit $\underline{k}=0$

$(\underline{p} = \hbar \underline{k} = 0)$

(sinnvolle Annahme, falls: schwache Wechselwirkung)

$$\text{also} \quad N_0 = \langle \Psi_0 | \overbrace{\hat{a}^+_{\underline{k}=0}\, \hat{a}_{\underline{k}=0}}^{\hat{n}_{\underline{k}=0}} | \Psi_0 \rangle$$

Vielteilchenzustand bei $T=0$ zur Teilchenzahl N_0

$\sim N$

Gesamtteilchenzahl

(wir betrachten also eine Situation unterhalb der BE-Kondensationstemperatur)

betrachte übliche Relation für Erzeuger/Vernichter

$$\hat{a}_{\underline{k}=0} \underbrace{|\Psi_0\rangle_{N_0}}_{\substack{\text{Vielteilchenzustand} \\ \text{(zur Teilchenzahl } N_0)}} = \sqrt{N_0}\, |\Psi_0\rangle_{N_0-1}$$

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

$$\left(\hat{a}_{\underline{k}=0}\, \hat{a}^+_{\underline{k}=0} - \hat{a}^+_{\underline{k}=0}\, \hat{a}_{\underline{k}=0} \right) |\Psi_0\rangle_{N_0} = (N_0 + 1 - N_0) |\Psi_0\rangle_{N_0}$$

Da wir schon im (partiell) kondensierten Zustand, können wir den Unterschied zw. N_0+1 und N_0 vernachlässigen!

$$\text{Damit:} \quad \hat{a}^+_{\underline{k}=0}\, \hat{a}_{\underline{k}=0} |\Psi_0\rangle_{N_0} = \hat{a}_{\underline{k}=0}\, \hat{a}^+_{\underline{k}=0} |\Psi_0\rangle_{N_0} = N_0 |\Psi_0\rangle_{N_0}$$

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

Näherung!

Achtung: gilt ~~nur~~ nur bei $\underline{k}=0$, nicht für $\underline{k}\neq 0$

(angeregte Zustände)

Dies impliziert:

Die Operatoren $\hat{a}, \hat{a}^+$ (für $\underline{k}=0$) werden effektiv durch Zahlen genähert

(**) $\boxed{\hat{a}_{\underline{k}=0} = \hat{a}^+_{\underline{k}=0} = \sqrt{N_0}}$ „Bogoliubov-Vorschrift"

Folgerungen für den Hamiltonian (*) ?

Wir können Terme von der Ordnung N_0 identifizieren,

da $N_0 \gg 1$ $(N_0 \sim N)$, sollten diese Terme dominant sein!

Einteilchenterm:

$$\sum_{\underline{k}} \varepsilon_k \hat{a}^+_{\underline{k}} a_{\underline{k}} = \cancel{\varepsilon_{k=0} \hat{a}^+_{\underline{k}=0} \hat{a}_{\underline{k}=0}} + \underbrace{\sum_{\underline{k}\neq 0} \varepsilon_k \hat{a}^+_{\underline{k}} \hat{a}_{\underline{k}}}_{\text{angeregte Zustände}}$$

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

$$\boxed{\underbrace{\varepsilon_{k=0}}_{=0} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\Big|_{k=0}}$$

Zweiteilchenterm: enthält Summen über $\hat{a}^+_{\tilde{\underline{k}}+q} \hat{a}^+_{\underline{k}-\tilde{\underline{k}}} \hat{a}_{\underline{k}} \hat{a}_q \tilde{V}_{\tilde{\underline{k}}}$ — Fouriertransf. des Potentials

$\tilde{\underline{k}} = \underline{k} = q = 0$: $\tilde{V}_0 \hat{a}^+_0 \hat{a}^+_0 \hat{a}_0 \hat{a}_0 \overset{\text{Bogoliubov}}{=} \tilde{V}_0 N_0^2$ Ordnung $\sim N_0^2$

(Notation: $0 \hat{=} \underline{k}=0$)

Kombinationen, wo 2 Erzeuger oder Vernichter beim Wellenvektor 0 auftreten

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

② $\underline{k} = -\underline{q} = \underline{\tilde{k}}$: $\tilde{V}_{\tilde{k}} \underbrace{\hat{a}_0^+ \hat{a}_0^+}_{N_0} \hat{a}_{\tilde{k}} \hat{a}_{-\tilde{k}} = \tilde{V}_{\tilde{k}} \hat{a}_{\tilde{k}} \hat{a}_{-\tilde{k}} N_0 \qquad \sim N_0$

⋮

⑥

Man findet : es gibt 6 Termkombinationen, die linear in N_0 sind, und einen Term $\sim N_0^2$

Alle anderen Terme enthalten entweder nur einen oder gar keinen "Operator" bei $\underline{k}=0$

dies sind Terme $\mathcal{O}(\sqrt{N_0})$ oder $\mathcal{O}(1)$

Jetzt:
Wir vernachlässigen diese Terme gegenüber denen der Ordnung N_0 bzw N_0^2 !

(im Zweiteilchenbeitrag!)

Interpretation: Dadurch vernachlässigen wir Wechselwirkungen der angeregten Teilchen untereinander!

Wir behalten nur noch Wechselwirkungen innerhalb des Kondensats und solche mit dem Kondensat

$$\Rightarrow \boxed{\hat{H}_{\text{eff}} = \sum_{\substack{\underline{k}\neq 0 \\ \text{angeregte Zustände}}} \left(\varepsilon_k + \frac{N_0}{V}\tilde{V}_0 + \frac{N_0}{V}\tilde{V}_{\underline{k}} \right) \hat{a}_{\underline{k}}^+ \hat{a}_{\underline{k}} + \frac{N_0^2 \tilde{V}_0}{2V} + \sum_{\underline{k}\neq 0} \frac{N_0 \tilde{V}_k}{2V} \left(\hat{a}_{\underline{k}}^+ \hat{a}_{-\underline{k}}^+ + \hat{a}_{\underline{k}} \hat{a}_{-\underline{k}} \right)}$$

effektiver Hamiltonian!

- erster Term $\left(\sum_{\underline{k}\neq 0} \cdots\right)$ hat die Form eines effektiven Einteilchenhamiltonians!

- zweiter Term: Konstante, hängt ab von der Dichte $\frac{N_0}{V}$
und von $\tilde{V}_0 = \tilde{V}_{\underline{k}=0} \approx \int d\underline{r}\ U(\underline{r})$
Wechselwirkungspotential

- dritter Term: Unbekannte Form!