Wechselwirkende Bosonen — Hamilton-Operator in 2. Quantisierung / Impulsdarstellung

$$\hat{H} = \sum_{\underline{k}} \varepsilon_k \hat{a}_{\underline{k}}^+ \hat{a}_{\underline{k}} + \frac{1}{2V} \sum_{\tilde{k}} \sum_{\underline{k}} \sum_{q} \tilde{V}_{\tilde{k}} \hat{a}^+_{\tilde{k}+q} \hat{a}^+_{\underline{k}-\tilde{k}} \hat{a}_{\underline{k}} \hat{a}_q$$

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

Fouriertransformierte des Wechselwirkungspotential zum Wellenvektor $\tilde{k}$

Wir nehmen an: Bei tiefen Temperaturen wird — wie beim idealen Bose-Gas — der Grundzustand makroskopisch besetzt

$N_0 \gg 1$ Zahl der Bosonen im Zustand $|\psi_0^{(1)}\rangle = |\psi_{\underline{k}=0}\rangle = |\psi_0\rangle_{N_0}$

$N_0 = O(N)$ Gesamtteilchenzahl

Folgerung: (Näherung)

$$\hat{a}_{\underline{k}=0} |\psi_0\rangle_{N_0} = \sqrt{N_0}\, |\psi_0\rangle_{N_0-1}$$

$$\hat{a}^+_{\underline{k}=0} |\psi_0\rangle_{N_0} = \sqrt{N_0+1}\, |\psi_0\rangle_{N_0+1}$$

$$\underbrace{\left(\hat{a}_{\underline{k}=0} \hat{a}^+_{\underline{k}=0} - \hat{a}^+_{\underline{k}=0} \hat{a}_{\underline{k}=0}\right)}_{\text{Kommutator}} |\psi_0\rangle_{N_0} = \left((N_0+1) - (N_0)\right)|\psi_0\rangle_{N_0}$$

≈ 0 !!

(Unterschied zw. N_0+1 und N_0 ist vernachlässigbar wenn $N_0 \gg 1$)

$$\Longleftrightarrow \hat{a}^+_{\underline{k}=0} \hat{a}_{\underline{k}=0} |\psi_0\rangle_{N_0} \approx \hat{a}_{\underline{k}=0} \hat{a}^+_{\underline{k}=0} |\psi_0\rangle \approx N_0 |\psi_0\rangle$$

$\Longrightarrow$ Die Operatoren $\hat{a}_{\underline{k}=0}, \hat{a}^+_{\underline{k}=0}$ werden damit effektiv durch Zahlen genähert.

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

Achtung:
Gilt nur bei $\underline{k}=0$, nicht für die angeregten Zustände ($\underline{k} \neq 0$)

Folgerungen dieser Näherung für den Hamiltonian?

Ziel: Isoliere Terme von der Ordnung N_0 oder N_0^2, da diese für $N_0 \gg 1$ dominieren!

Einteilchenterm in $\hat{H}$

$$\sum_{\underline{k}} \varepsilon_k \hat{a}^+_{\underline{k}} \hat{a}_{\underline{k}} = \varepsilon_0 \overbrace{\hat{a}^+_0 \hat{a}_0}^{N_0} + \sum_{\underline{k}\neq 0} \varepsilon_k \hat{a}^+_{\underline{k}} \hat{a}_{\underline{k}} \quad , \quad \varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$\hat{a}^+_0 = \hat{a}^+_{\underline{k}=0}$, $\hat{a}_0 = \hat{a}_{\underline{k}=0}$ $\qquad$ $\varepsilon_k \longrightarrow 0$ für $k \to 0$

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

Zweiteilchenterm in $\hat{H}$:

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

betrachte Terme mit $\overbrace{\text{ }}^{\text{zwei oder mehr}}$ verschwindenden Indizes der Erzeuger/Vernichter

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

① $\underline{k} = \underline{q} = 0$, $\underline{\tilde{k}} \neq 0$: $\quad \tilde{V}_{\underline{\tilde{k}}} \hat{a}^+_{\underline{\tilde{k}}} \hat{a}_{-\underline{\tilde{k}}} \underbrace{\hat{a}_0 \hat{a}_0}_{N_0} \qquad \sim N_0$

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

③ $\underline{k} = \underline{\tilde{k}}$, $\underline{q} = 0$: $\quad \tilde{V}_{\underline{\tilde{k}}} \hat{a}^+_{\underline{\tilde{k}}} \hat{a}^+_0 \hat{a}_{\underline{\tilde{k}}} \hat{a}_0 = \tilde{V}_{\underline{k}} \hat{a}^+_{\underline{\tilde{k}}} a_{\underline{\tilde{k}}} N_0 \qquad \sim N_0$

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

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

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

Es gibt einen Term quadratisch in N_0, und 6 Terme linear in N_0.
Alle anderen Terme enthalten entweder nur einen oder keinen Operator mit Index 0 $\longrightarrow$ dies sind Terme $O(\sqrt{N_0})$ oder $O(1)$

Wir vernachlässigen nun diese Terme gegenüber denen $\mathcal{O}(N_0)$ oder $\mathcal{O}(N_0^2)$

da $N_0 \gg 1$!!

Interpretation:

Wir vernachlässigen die Wechselwirkung der angeregten Teilchen ($\underline{k} \neq 0$) untereinander und beschränken uns auf Wechselwirkung mit oder im "Kondensat" ($\underline{k}=0$)

Es ergibt sich (in diesem Näherung)

$$\hat{H} \longrightarrow \sum_{\underline{k}\neq 0} \varepsilon_k \hat{a}^+_{\underline{k}} \hat{a}_{\underline{k}} + \frac{1}{2V} \tilde{V}_0 N_0^2$$

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

$$+ \frac{1}{2V}\Big(\sum_{\underline{k}\neq 0} \tilde{V}_0 \hat{a}^+_{\underline{k}} \hat{a}_{\underline{k}} + \sum_{\underline{q}\neq 0} \tilde{V}_0 \hat{a}^+_{\underline{q}} \hat{a}_{\underline{q}} \Big) \cdot N_0$$

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

(3), (6), (5), (4), (1), (2)

V: Volumen

$\tilde{V}_0$: Fourier-Komponente der Wechselwirkung bei $\underline{k}=0$!

Hier können die beiden Terme jeweils zusammengefasst werden, da über alle Wellenvektoren summiert wird!

$\Longrightarrow$ Es ergibt sich der effektive Hamiltonian

$$\boxed{H_{eff} = \sum_{\underline{k}\neq 0} \Big(\underbrace{\varepsilon_k + \frac{N_0}{V}\tilde{V}_0 + \frac{N_0}{V}\tilde{V}_{\underline{k}}}_{\tilde{\varepsilon}_k}\Big) \hat{a}^+_{\underline{k}} \hat{a}_k + \frac{N_0^2 \tilde{V}_0}{2V} + \sum_{\underline{k}\neq 0} \frac{N_0 \tilde{V}_k}{2V} \left(\hat{a}^+_{\underline{k}} \hat{a}^+_{-\underline{k}} + \hat{a}_{\underline{k}} \hat{a}_{-\underline{k}} \right)}$$

Interpretation der Terme in Heff

- Erster Term: effektiver Einteilchen-Hamiltonian von der Form $\hat{a}^+\hat{a}$
mit "renormierter" Einteilchenenergie

$$\widetilde{\varepsilon_{\underline{k}}} = \varepsilon_k + \frac{N_0}{V}\left(\tilde{V}_0 + \tilde{V}_{\underline{k}}\right)$$

Fourier-Komponenten der Wechselwirkung

Im wechselwirkungsfreien Fall reduziert sich $\widetilde{\varepsilon}_{\underline{k}}$ auf $\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

- Zweiter Term: Kein Operator,
abhängig von der Dichte des Kondensats $\left(\frac{N_0}{V}\right)$
und $\tilde{V}_0 = \tilde{V}_{\underline{k}=0}$

- Dritter Term: enthält Paare von Erzeugern bzw. Vernichtern
„unbekannte" Terme ... !

Bemerkung:
Die Gesamtteilchenzahl ist gegeben $\hat{N} = N_0 + \sum_{\underline{k}\neq 0} \hat{a}^+_{\underline{k}} \hat{a}_{\underline{k}} = N_0 + \sum_{\underline{k}} \hat{n}_{\underline{k}}$

Wie weiter ??

Ausgehend von Heff bilden wir nun einen Hamiltonian in Einteilchenform
(„Diagonalisierung")

$$\hat{H}_{eff} = \sum_{\underline{k}\neq 0} \omega_k \, \hat{a}^+_{\underline{k}} \hat{a}_{\underline{k}}$$

Begründung: mit $\hat{H}_{eff}$ in Einteilchenform kann man „bequem" weiterarbeiten, z.B. statist. Eigenschaften betrachten!

Strategie: Bogoliubov-Transformation

3) Bogoliubov-Transformation

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

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

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

mit $u_{\underline{k}}, v_{\underline{k}} \in \mathbb{R}$
mit $u_{\underline{k}} = u_{-\underline{k}}$, $v_{\underline{k}} = v_{-\underline{k}}$

Die Operatoren $\hat{\alpha}^+_{\underline{k}}$, $\hat{\alpha}_{\underline{k}}$ sind neue Erzeuger und Vernichter
(später: von „Quasiteilchen“)

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

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

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

Diese Relation sind erfüllt falls $u_{\underline{k}}^2 - v_{\underline{k}}^2 = 1$ (**)

Zeige z.B. dass (*) mit (**) auf $[\hat{a}_{\underline{k}}, \hat{a}_{\underline{k}'}^+] = \delta_{\underline{k},\underline{k}'}$ führt ... (Zu Hause!)

Umkehrtransformation:

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

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

Schreibe nun den Hamiltonian H_{eff} mit (*) um.
Betrachte dazu die folgenden Produkte:

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

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

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

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

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

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

Sortiere nun die Terme in solche, in denen $\alpha^+\alpha$ vorkommt (erwünschte Terme!) und solche, die nicht proportional zu $\alpha^+\alpha$ sind (unerwünscht, da die nicht Einteilchen-Hamilton-Form!)

Alle Terme, die nicht proportional zu $\alpha^+\alpha$ sind, sollen verschwinden!

$$\Big(\tilde{\varepsilon}_{\underline{k}}\, u_{\underline{k}} v_{\underline{k}} \left(\alpha^+_{\underline{k}} \alpha^+_{-\underline{k}} + \alpha_{\underline{k}} \alpha_{-\underline{k}} \right) + \frac{N_0}{2V} \tilde{V}_{\underline{k}} \left(u_{\underline{k}}^2 + v_{\underline{k}}^2 \right) \left(\alpha^+_{\underline{k}} \alpha^+_{-\underline{k}} + \alpha_{\underline{k}} \alpha_{-\underline{k}} \right) \Big) \stackrel{!}{=} 0 \qquad \forall\, \underline{k} \neq 0$$

$$\Longleftrightarrow \quad \tilde{\varepsilon}_{\underline{k}}\, u_{\underline{k}} v_{\underline{k}} + \frac{N_0}{2V} \tilde{V}_{\underline{k}} \left(u_{\underline{k}}^2 + v_{\underline{k}}^2 \right) \stackrel{!}{=} 0 \qquad \text{I}$$

außerdem muß gelten: $u_{\underline{k}}^2 - v_{\underline{k}}^2 = 1$ II (zur Erfüllung der Kommutator-Relation)

Man findet (aus den beiden Gleichungen I, II)

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

$$v_{\underline{k}}^2 = \frac{-\omega_{\underline{k}} + \tilde{\varepsilon}_{\underline{k}}}{2\omega_{\underline{k}}}$$

$$u_{\underline{k}} v_{\underline{k}} = -\frac{N_0}{2V} \frac{\tilde{V}_{\underline{k}}}{\omega_{\underline{k}}}$$

Ergebnis für den effektiven Hamiltonian (nach Bogoliubov-Transformation)

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

Man sieht:

- $\hat{H}_{\text{eff}}$ ist „diagonal" in den neuen Erzeugern/Vernichtern α^+/α
  (hat Einteilchenform in diesen neuen Operatoren)

- $\hat{H}_{eff}$ beschreibt „abstrakte Bosonen" („Quasiteilchen") mit Energie $\hbar\omega_{\underline{k}}$ und Impuls $\underline{k}$ — denn die $\hat{\alpha}^+, \hat{\alpha}$ erfüllen bosonische Vertauschungsrelation!

- Die neuen Erzeuger und Vernichter sind Linearkombination der ~~tot~~ ursprünglichen Operatoren $\hat{a}^+, \hat{a}$

$$\text{z.B. } \hat{\alpha}_{\underline{k}} = u_{\underline{k}}\, \hat{a}_{\underline{k}} - v_{\underline{k}}\, \hat{a}^+_{-\underline{k}}$$

$\rightarrow$ man überlagert letztendlich Zustände mit unterschiedlicher Teilchenzahl!
(konsistent mit unserer Voraussetzung $N_0+1 \simeq N_0 \gg 1$)

- Die Bogoliubov-Transformation besitzt eine formale Analogie zu einer kanonischen Transformation in der klass. Mechanik

(klass.) Hamiltonformalismus: $\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}$, $\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$

Kanon. Transformation: $(q,p) \rightarrow (Q,P)$

So dass die kanon. Gleichungen invariant bleiben!

d.h. $\dot{Q}_i = \frac{\partial H}{\partial P_i}$ mit ~~H~~ $H(Q(q,p), P(q,p))$

$\dot{P}_i = -\frac{\partial H}{\partial Q_i}$

Kriterium für kanonische Transformation

$$\underbrace{\{F,G\}_{p,q}}_{\text{Poisson-Klammer}} = \sum_i \left(\frac{\partial F}{\partial q_i}\frac{\partial G}{\partial p_i} - \frac{\partial G}{\partial q_i}\frac{\partial F}{\partial p_i} \right)$$

$$\overset{!}{=} \{F,G\}_{P,Q} = \sum_i \left(\frac{\partial F}{\partial Q_i}\frac{\partial G}{\partial P_i} - \frac{\partial G}{\partial P_i}\frac{\partial F}{\partial Q_i} \right)$$

Dies ist analog zu unserer Forderung bei der Bogoliubov-Transformation, dass die (bosonische) Vertauschungsrelation erhalten bleiben soll!