Hartree Fock-Verfahren in 2. Quantisierung

$\rightarrow$ Übungen

II.7. Bosonen bei tiefen Temperaturen

Wir betrachten zunächst den wechselwirkungsfreien Fall ($\rightarrow$ s.a. VL Thermodynamik und Statistik)

Was erwarten wir?

tiefe Temperaturen (T): System will Energie minimieren

$\rightarrow$ Bosonen besetzen möglichst tiefe Energieniveaus

Beachte: Bosonen folgen nicht dem Pauli-Prinzip!

$\Rightarrow$ im Prinzip können alle (N) Teilchen den (Einteilchen-)Grundzustand besetzen

Wir erwarten also: $\langle \hat{n}_{\alpha_0} \rangle \sim N$ für $T \to 0$ „makroskopische Besetzung des Grundzustands"

α_0: Quantenzustand, der der tiefsten Energie entspricht

Aber: Die Besetzung des Grundzustands verläuft nicht trivial!
Zwischen dem Hochtemperaturzustand (Verteilung gemäß Bose-Einstein-Statistik) und der Besetzung des Grundzustands findet eine Art Phasenübergang statt:
„Bose-Einstein-Kondensation"

Betrachte wieder Teilchen in Box (keine Wechselwirkung, kein Spin)

Einteilchenenergien $\varepsilon_\alpha \rightarrow \varepsilon_{\underline{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

Bose-Einstein-Statistik

$$\langle n_\alpha \rangle \longrightarrow \langle n_{\underline{k}} \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{\underline{k}}-\mu)}-1}$$

mit μ chem. Potential und $\underline{p} = \hbar \underline{k}$

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

(T, V, μ fest $\hat{=}$ großkanonisches Ensemble) (V: Volumen)

Damit $\langle n_{\underline{k}} \rangle$ positiv und endlich ist, muß gelten

$$e^{\beta\left(\frac{p^2}{2m}-\mu\right)} - 1 > 0 \iff e^{\beta\left(\frac{p^2}{2m}-\mu\right)} > 1$$

Soll auch für $p = \underline{k} = 0$! $\quad e^{-\beta\mu} > 1$

$$\iff \mu < 0$$

bzw. $z = e^{\beta\mu} < 1$ (Fugazität)

Betrachte die mittlere Teilchendichte

$$\rho = \frac{\langle \hat{N} \rangle}{V} = \frac{1}{V}\sum_{\underline{k}} \langle \hat{n}_{\underline{k}} \rangle = \frac{1}{V}\sum_{\underline{k}} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k-\mu)}-1} \quad (*)$$

Teilchenzahloperator

Betrachte ~~sehr~~ große Systeme $\Rightarrow$ V groß $\Rightarrow$ Abstände zwischen den Werten von $\underline{k}$ werden klein

(denn $\underline{k} = \frac{2\pi}{L}(n_x, n_y, n_z)$)

$L \approx V^{\frac{1}{3}}$

$\Rightarrow$ Abstände zw. Energieniveaus werden klein

$\Rightarrow$ Nähere die Summe in $(*)$ durch Integral!

$$\Rightarrow \rho = \frac{\langle N \rangle}{V} = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d\underline{k}\, \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k-\mu)}-1} \overset{\text{Kugelkoordinaten}}{=} \frac{4\pi}{(2\pi)^3}\int_0^\infty dk\, k^2 \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k-\mu)}-1} \quad \left(\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right)$$

Das kann man auswerten

man findet:

$$\boxed{\rho = \frac{1}{\lambda_T^3}\, g_{3/2}(z)}$$

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

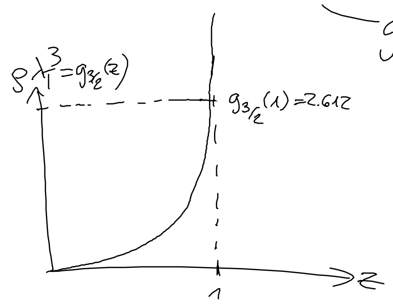
thermische Wellenlänge

Dichte als Funktion von μ, T

$$g_\nu(z) = \frac{1}{\Gamma(\nu)}\int_0^\infty dx\, \frac{x^{\nu-1}}{e^x z^{-1}-1} \quad \text{mit } z = e^{\beta\mu}$$

Gammafunktion

graphisch



man sieht:

- Für $\rho\lambda_T^3 < 2.612$ ist $z<1$ und z wächst mit der Dichte
- Für $\rho\lambda_T^3 > 2.612$ kann man nicht mehr nach z auflösen!

$\Rightarrow$ Definiere kritische Temperatur T_C, unterhalb der der Zusammenhang nicht mehr auflösbar ist:

$$\rho\lambda_T^3\Big|_{T_C} = g_{3/2}(1) = 2.612$$

mit Ausdruck für λ_T $\Rightarrow T_C = \frac{2\pi\hbar^2}{k_B m}\left(\frac{\rho}{2.612}\right)^{\frac{2}{3}}$

$$\sim \rho^{2/3}$$

- $\rho\lambda_T^3 < 2.612$ $(T>T_C)$: Zusammenhang auflösbar, z ist im erlaubten Bereich
- $\rho\lambda_T^3 > 2.612$ $(T<T_C)$: $z \to 1$ $\Leftrightarrow e^{\beta\mu} = 1$, $\mu = 0$!

Für $z=1$ ist $\langle \hat{n}_{\underline{k}=0} \rangle = \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_0} z^{-1} - 1}$

$$\varepsilon_{\underline{k}=0} = 0 \qquad - \frac{1}{z^{-1}-1} \to \infty \;!$$

Wie löst man das Problem richtig?

Der "Fehler" war der einfache Übergang von der Summe zum Integral bei der Berechnung der Dichte

Jetzt vorsichtiger:

$$\rho = \frac{\langle \hat{N} \rangle}{V} = \frac{1}{V}\langle \hat{n}_{\underline{k}=0} \rangle + \underbrace{\frac{1}{V}\sum_{\underline{k}\neq 0} \langle \hat{n}_{\underline{k}} \rangle}$$

$\frac{1}{e^{\beta(\frac{\hbar^2 k^2}{2m}-\mu)}-1}$

also Separation des Beitrags für $\underline{k}=0$ $\hat{=}$ Grundzustand

Dieser Term bleibt auch für $\mu \to 0$ endlich und kann daher wie vorher betrachtet werden

$$\Rightarrow \rho = \frac{1}{V}\langle \hat{n}_{\underline{k}=0}\rangle + \lambda_T^{-3}\, g_{3/2}(z) \qquad \text{mit } z = e^{\beta\mu}$$

$$= \frac{1}{V}\frac{1}{z^{-1}-1} + \lambda_3^{-3}\, g_{3/2}(z)$$

$$= \underbrace{\rho_0(T,\mu)}_{\substack{\text{Anteil der} \\ \text{Bosonen im} \\ \text{Grundzustand}}} + \underbrace{\rho_n(T,\mu)}_{\substack{\text{Anteil der Bosonen} \\ \text{in den angeregten Zuständen!}}}$$

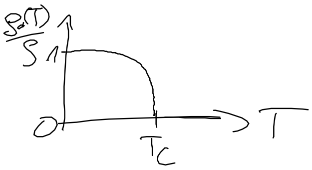
Betrachte diesen Ausdruck als Funktion der Temperatur. Man findet: (im Limes $N\to\infty$)

$$\underset{\text{Gesamtdichte}}{\rho(T,\mu)} = \begin{cases} \rho_n(T,\mu) = \lambda_T^{-3}\, g_{3/2}(z), & T > T_C \quad \text{nur angeregte Zustände!} \\ \underbrace{\rho_0(T) + \rho_n(T,\mu=0)}_{\substack{\text{Gemisch aus Bosonen im Grundzustand} \\ \text{und im angeregten Zustand!}}}, & T < T_C \end{cases}$$

Außerdem:

$$\frac{\rho_0(T)}{\rho} = \left\{ \begin{array}{ll} 0, & T > T_C \\ 1-\left(\frac{T}{T_C}\right)^{3/2}, & T < T_C \end{array} \right\} \quad \text{„Bose-Einstein-(BE) Kondensation"!}$$

Wir können also $\frac{\rho_0(T)}{\rho}$ als „Ordnungsparameter" auffassen.



Für $T \to 0$ gilt $\rho_0 = \rho$
alle Bosonen im Grundzustand!

- Die BE-Kondensation ist ein rein quantenmechan. Phänomen, folgt aus BE-Statistik bzw. der Symmetrie der Wellenfunktion! (Keine Wechselwirkung!)

- Erste theoret. Arbeiten: Bose 1924
  Einstein 1925

• Erste experimentelle Realisierung: 1995 mit stark verdünnten Gasen aus Alkali-Atomen

Nobelpreis 2001 (Ketterle)

• BE-Kondensation setzt ein, wenn $\rho \lambda_T^3 = 2.612$

also $\underbrace{\rho^{-\frac{1}{3}}}_{\text{mittlerer Teilchenabstand}} = \mathcal{O}(\lambda_T^3)$

Maß für Ausdehnung des quantenmechan. Wellenpakets

II.8. Wechselwirkende Bosonensysteme

Bisher: wechselwirkungsfreie Bosonen

(Historisch frühe) Motivation, sich mit wechselwirkenden Bosonensystemen zu beschäftigen

"Lambda-Übergang" in Helium 4

besteht aus 2 Protonen, 2 Elektronen

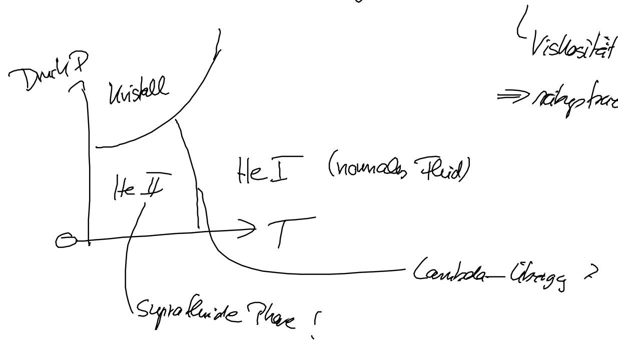
$\Rightarrow$ effektives Boson

- im Unterschied zu anderen atomaren Bosonen bleibt Helium 4 flüssig bis hin zu sehr tiefen Temperaturen!

- Bei $T = 2.18$ K tritt ein Übergang in eine suprafluide Phase auf

Viskosität $\eta \to 0$

$\Rightarrow$ reibungsfreie Strömung



Frage: Gibt es Zusammenhang mit BE-Kondensation? Rolle der Wechselwirkung?

Form der Wechselwirkungen: Näherungsweise Lennard-Jones-Potential

$$V(r) = 4\varepsilon\left(\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right)$$

Repulsion

Attraktion durch Fluktuation der Dipolmomente

Theoretische Beschreibung eines wechselwirkenden Bosonensystems

Wir betrachten Bosonen mit Spin $s=0$ in Impulsdarstellung (→ Kap. II.4)

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

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

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

$\underline{r}$: Relativvektor zw. zwei Teilchen

Im Zweiteilchenterm wählen wir die Summationsindizes jetzt etwas anders: ersetze $\underline{k} = \underline{q} + \underline{\tilde{k}}$, $\underline{q} = \underline{k} - \underline{\tilde{k}}$ (das geht, da man über alle $\underline{k}, \underline{\tilde{k}}, \underline{q}$ in alle Richtungen summiert)

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

Wir nehmen nun an:

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

$\Leftrightarrow N_0 \gg 1$ (nämlich $N_0 = O(N)$) — N: Gesamtteilchenzahl

N_0: Zahl der Bosonen im Grundzustand

$$|\psi_0\rangle^{(+)} = |\psi_{\underline{k}=0}\rangle^{(+)} = |\psi_0\rangle_{N_0}$$

bosonischer Vielteilchen-Grundzustand

$$\Rightarrow N_0 = {}_{N_0}\langle \Psi_0 | \underbrace{\hat{a}^+_{\underline{k}=0}\, \hat{a}_{\underline{k}=0}}_{\hat{n}_{\underline{k}=0}} | \Psi_0 \rangle_{N_0} = \mathcal{O}(N)$$ makroskop. Besetzung

Betrachte (übliche) Relation zur Wirkung der Erzeuger/Vernichter

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

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

Bei tiefen Temperaturen ist $N_0 \gg 1$ $\Longrightarrow$ wir können den Unterschied zwischen N_0 und N_0+1 bzw. N_0-1 vernachlässigen!

Nur bei sehr tiefen Temperaturen sinnvoll

Daraus folgt auch:

$$\underbrace{\hat{a}^+_{\underline{k}=0}\, \hat{a}_{\underline{k}=0}}_{\hat{n}_{\underline{k}=0}} |\Psi_0\rangle_{N_0} = N_0 |\Psi_0\rangle \overset{\text{Näherung}}{\approx} \hat{a}_{\underline{k}=0}\, \hat{a}^+_{\underline{k}=0} |\Psi_0\rangle \quad !!$$

$$\Longrightarrow \left[\hat{a}_{\underline{k}=0}, \hat{a}^+_{\underline{k}=0}\right]_- \approx 0$$ Näherung !!

Kommutator verschwindet !!

Die Näherung gilt nur bei $\underline{k}=0$, da nur $N_0 \gg 1$, nicht bei den angeregten Zuständen !!

Dies motiviert die sogenannte „Bogoliubov-Vorschrift":

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

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