Wechselwirkende Bosonensysteme

1) Hintergrund: BE-Kondensation im "idealen" Bose-Gas
(Bose-Einstein) — keine Wechselwirkung!

2) Beschreibung im Rahmen der 2. Quantisierung

Ausgangspunkt (Impulsdarstellung) $p = \hbar \underline{k}$

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

Volumen; $\tilde{V}$: Fouriertransformierte des Paarpotentials

tiefe Temperaturen, schwache Wechselwirkung:
makroskopische Besetzung des Grundzustands!

N_0 sehr groß (von der Ordnung der Gesamtteilchenzahl N)

Zahl der Teilchen im Grundzustand

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

Näherung:

Bogoliubov-Vorschrift:
$$\hat{a}^+_{\underline{k}=0} \longrightarrow \sqrt{N_0}$$
$$\hat{a}_{\underline{k}=0} \longrightarrow \sqrt{N_0}$$
Zahlen, keine Operatoren!

isoliere im $\hat{H}$ die Terme der Ordnung N_0^2 und N_0 und vernachlässige die anderen Terme

Wechselwirkungsanteil von

$$\Rightarrow \text{Effektiver Hamiltonian: } \hat{H}_{eff} = \sum_{\underline{k}\neq 0} \Big(\overbrace{\varepsilon_k + \frac{N_0}{V}\tilde{V}_0 + \frac{N_0}{V}\tilde{V}_{\underline{k}}}^{\text{effektive Einteilchenenergie}}\Big) \hat{a}^+_{\underline{k}} \hat{a}_{\underline{k}}$$
effektiver Einteilchen-Hamiltonian

$$+ \frac{N_0^2}{2V}\tilde{V}_0$$
Konstante, abhängig von der Dichte des Kondensats $\left(\frac{N_0}{V}\right)$ und von $\tilde{V}_0$

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

ungewöhnliche Terme

Zur weiteren Behandlung wollen wir $\hat{H}_{eff}$ <u>insgesamt</u> in Einteilchenform bringen!

Strategie: Bogoliubov-Transformation

$$\left(\longrightarrow \hat{H}_{eff} = \sum_{\underline{k}\neq 0} \omega_k \hat{a}^+_{\underline{k}} \hat{a}_{\underline{k}} + \text{Konstante} \right)$$

3) Bogoliubov-Transformation

Ansatz: $$\boxed{\begin{aligned} \hat{a}_{\underline{k}} &= u_{\underline{k}}\, \hat{\alpha}_{\underline{k}} + v_{\underline{k}}\, \hat{\alpha}^{+}_{-\underline{k}} \\ \hat{a}^{+}_{\underline{k}} &= u_{\underline{k}}\, \hat{\alpha}^{+}_{\underline{k}} + v_{\underline{k}}\, \hat{\alpha}_{-\underline{k}} \end{aligned}} \quad (*)$$

Die Operatoren $\hat{\alpha}^{+}_{\underline{k}}$, $\hat{\alpha}_{\underline{k}}$ sind neue ~~Erzeugungs~~- bzw. Vernichtungs~~operatoren~~!

Die Vorfaktoren $u_{\underline{k}}, v_{\underline{k}}$ sind reell und es gilt: $u_{\underline{k}} = u_{-\underline{k}}$, $v_{\underline{k}} = v_{-\underline{k}}$

Fordere zunächst: $\hat{\alpha}_{\underline{k}}, \hat{\alpha}^{+}_{\underline{k}}$ erfüllen (genauso wie $\hat{a}_{\underline{k}}, \hat{a}^{+}_{\underline{k}}$) die Bose-Vertauschungsrelation!

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

(Erhaltung der Kommutatoren!)

Man kann zeigen: Dies ist erfüllt, falls $\boxed{u_{\underline{k}}^2 - v_{\underline{k}}^2 = 1}$ $(**)$

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

Benutze z.B.

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

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

$$\hat{a}_{\underline{k}} \hat{a}_{-\underline{k}} = \ldots$$

Einsetzen in $\hat{H}_{eff}$

$$\hat{H}_{eff} = \sum_{\underline{k}\neq 0} \tilde{\varepsilon}_k \Big(u_k^2 \hat{\alpha}^+_{\underline{k}} \hat{\alpha}_{\underline{k}} + v_k^2 \underbrace{\hat{\alpha}_{-\underline{k}} \hat{\alpha}^+_{-\underline{k}}}_{1+\hat{\alpha}^+_{-\underline{k}}\hat{\alpha}_{-\underline{k}}} + u_k v_k \left(\hat{\alpha}^+_{\underline{k}} \hat{\alpha}^+_{-\underline{k}} + \hat{\alpha}_{\underline{k}} \hat{\alpha}_{-\underline{k}}\right)\Big)$$

$$\tilde{\varepsilon}_k = \underbrace{\varepsilon_k}_{\frac{\hbar^2 k^2}{2m}} + \frac{N_0}{V}\tilde{V}_0 + \frac{N_0}{V}\tilde{V}_{\underline{k}}$$

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

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

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

$$\tilde{\varepsilon}_k u_k v_k (\hat{\alpha}^+_{\underline{k}} \hat{\alpha}^+_{-\underline{k}} + \hat{\alpha}_{\underline{k}} \hat{\alpha}_{-\underline{k}}) + \frac{N_0}{2V} \tilde{V}_{\underline{k}} (u_k^2 + v_k^2)(\hat{\alpha}^+_{\underline{k}} \hat{\alpha}^+_{-\underline{k}} + \hat{\alpha}_{\underline{k}} \hat{\alpha}_{-\underline{k}}) \overset{!}{=} 0 \qquad \forall\, \underline{k}\neq 0$$

$$\Longleftrightarrow \tilde{\varepsilon}_k u_k v_k + \frac{N_0}{2V} \tilde{V}_{\underline{k}} (u_k^2 + v_k^2) \overset{!}{=} 0$$

ausserdem muß gelten $u_k^2 - v_k^2 = 1$ (zur Erfüllung der Bose-Vertauschungsrelation) ($\ast\ast$)

Die beiden Gleichungen lassen sich wie folgt erfüllen.

definiere: $\omega_{\underline{k}} = \left(\tilde{\varepsilon}_{\underline{k}}^2 - \left(\frac{N_0}{V} \tilde{V}_{\underline{k}}\right)^2 \right)^{\frac{1}{2}}$

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

$$\tilde{\varepsilon}_{\underline{k}} = \varepsilon_{\underline{k}} + \frac{N_0}{V}\tilde{V}_0 + \frac{N_0}{V}\tilde{V}_{\underline{k}}$$
mit $\varepsilon_{\underline{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

Ergebnis für den effektiven Hamiltonian (nach der Bogoliubov-Transformation)

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

mit $\omega_{\underline{k}} = \sqrt{\tilde{\varepsilon}_{\underline{k}}^2 - \left(\frac{N_0 \tilde{V}_0}{V}\right)^2}$

Bemerkungen

- $\hat{H}_{\text{eff}}$ ist "diagonal" in den Erzeugern / Vernichtern $\hat{\alpha}^+_{\underline{k}}, \hat{\alpha}_{\underline{k}}$
  ($\hat{=}$ hat Einteilchenstruktur !)

- $\hat{H}_{\text{eff}}$ enthält <u>abstrakte Bosonen</u> mit Energie $\hbar\omega_{\underline{k}}$ und Impuls $\underline{k}$
  in dem Sinne, dass die $\hat{\alpha}^+_{\underline{k}}, \alpha_{\underline{k}}$ bosonische Vertauschungsrelation erfüllen!

- Die neuen Erzeuger- bzw Vernichter sind (laut ⊛)
  Linearkombinationen der "alten" (ursprünglichen) Bosonen-Operatoren $\hat{a}^+_{\underline{k}}, \hat{a}_{\underline{k}}$

$$\begin{cases} \hat{\alpha}_{\underline{k}} = u_{\underline{k}} \hat{a}_{\underline{k}} - v_{\underline{k}} \hat{a}^+_{-\underline{k}} \\ \hat{\alpha}^+_{\underline{k}} = u_{\underline{k}} \hat{a}^+_{\underline{k}} - v_{\underline{k}} \hat{a}_{-\underline{k}} \end{cases} \quad \text{(Umkehrrelation zu ⊛)}$$

  $\rightarrow$ man überlagert Zustände mit unterschiedlichen Teilchenzahlen !

- Man nennt die neuen "Teilchen", die durch $\hat{\alpha}^+, \hat{\alpha}$ erzeugt bzw. vernichtet werden, <u>Quasiteilchen</u>

- Formale Analogie zur Bogoliubov-Transformation und Kanonischen Transformation (klass. Mechanik, Hamilton-Formalismus)

  $\Downarrow$ Erhaltung der (Bose-) Vertauschungsrelation

  $\Downarrow$ Erhaltung der Poisson-Klammern !

4) Folgerungen aus der Existenz der Quasiteilchen

Schreibe dazu $\hat{H}_{eff}$ noch etwas um

$$\hat{H}_{eff} = \underbrace{\frac{N_0^2 \tilde{V}_0}{2V} + \frac{1}{2}\sum_{\underline{k}\neq 0}\left(\hat{\tilde{\varepsilon}}_{\underline{k}} - \omega_{\underline{k}}\right)}_{\text{"Grundzustandsenergie"}} + \underbrace{\sum_{\underline{k}\neq 0} \omega_{\underline{k}}\, \hat{\alpha}^+_{\underline{k}} \hat{\alpha}_{\underline{k}}}_{\substack{\text{Energie aus den "Anregungen"} \\ \text{(Quasiteilchen)}}}$$

- Diese ist offensichtlich ungleich Null (anders als beim idealen Bose-System, dort ist die Grundzustands-Energie $\varepsilon_{\underline{k}\to 0} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\Big|_{\underline{k}\to 0} = 0$
- Und: Die Grundzustandsenergie erhält Beitrag aus der Summe $\sum_{\underline{k}\neq 0}\left(\hat{\tilde{\varepsilon}}_{\underline{k}} - \omega_{\underline{k}}\right)$
- Im Grenzfall verschwindender Wechselwirkung gilt $\tilde{V}_0 = 0$, $\hat{\tilde{\varepsilon}}_{\underline{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, $\omega_{\underline{k}} = \hat{\tilde{\varepsilon}}_{\underline{k}}$

  $\Rightarrow$ Grundzustandsenergie verschwindet!

Der Grundzustand $|\psi_0\rangle$ an sich ist dadurch festgelegt, dass keine Quasiteilchen existieren (Zahl der Quasiteilchen im Grundzustand ist Null!)

formal: $\hat{\alpha}_{\underline{k}}|\psi_0\rangle = 0 \quad \forall\, \underline{k}$

$$\Rightarrow \underbrace{\langle\psi_0|\hat{\alpha}^+_{\underline{k}}\hat{\alpha}_{\underline{k}}|\psi_0\rangle}_{\substack{\text{Zahl der Teilchen} \\ \text{im Grundzustand}}} = 0$$

Beachte: Trotzdem gibt es (in Anwesenheit von Wechselwirkung) im Grundzustand echte Bosonen (nicht Quasiteilchen) mit Impuls $\underline{k}\neq 0$!

Deren Zahl ist

drücke $\hat{a}^+, \hat{a}$ durch $\hat{\alpha}^+, \hat{\alpha}$ aus

$$\langle\psi_0|\sum_{\underline{k}\neq 0}\hat{a}^+_{\underline{k}}\hat{a}_{\underline{k}}|\psi_0\rangle = \ldots = \sum_{\underline{k}\neq 0} v_{\underline{k}}^2 > 0$$

Dispersionsrelation und Konsequenzen für die Wärmekapazität

betrachte

$$\omega_{\underline{k}} = \sqrt{\tilde{\varepsilon}_{\underline{k}}^{\,2} - \frac{N_0^2\,\tilde{V}_{\underline{k}}^2}{V^2}}\,,$$

mit Ausdruck für $\tilde{\varepsilon}_{\underline{k}}$

$$= \sqrt{\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{N_0}{V}\left(\tilde{V}_0 + \tilde{V}_{\underline{k}}\right)\right)^2 - \frac{N_0^2\,\tilde{V}_{\underline{k}}^2}{V^2}}$$

$$= \sqrt{\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right)^2 + \underbrace{\frac{\hbar^2 k^2 N_0}{mV}\left(\tilde{V}_0 + \tilde{V}_{\underline{k}}\right)} + \left(\frac{N_0 \tilde{V}_0}{V}\right)^2 \cancel{+\left(\frac{N_0 \tilde{V}_{\underline{k}}}{V}\right)^2} + \frac{2N_0\,\tilde{V}_0\tilde{V}_{\underline{k}}}{V} \cancel{-\frac{N_0^2\,\tilde{V}_{\underline{k}}^2}{V^2}}}$$

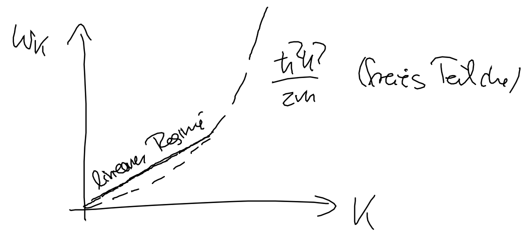
Im Grenzfall $k \to 0$ dominiert der Term $\sim k^2$ unter der Wurzel!

$\Longrightarrow \omega_{\underline{k}} \sim k$ für $k \to 0$ (falls $\tilde{V}_0, \tilde{V}_{\underline{k}}$ existiert!)

<u>Lineare</u> Dispersionsrelation aufgrund der Wechselwirkung!
(wie bei Phononen (Gitterschwingungen))

Im Limes großer Wellenzahlen ($k \to \infty$) dominiert der Term $\sim k^4$ unter der Wurzel!

$\omega_{\underline{k}} \sim k^2$ <u>quadratische</u> Dispersion
wie bei freien Teilchen!



Folgerungen für <u>die Wärmekapazität</u>:

$$C_V = \frac{\partial E}{\partial T}\bigg|_V$$

Energie

Temperatur

$$\langle E \rangle = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int d\underline{p} \; \underbrace{\varepsilon(\underline{p})}_{\hbar\omega_{\underline{p}}} \; n_{\underline{p}} \qquad \underline{p} = \hbar \underline{k}$$

Einteilchenstatistik

$$n_{\underline{p}} = \frac{1}{e^{\beta\varepsilon(\underline{p})} - 1}$$

Bose-Einstein Statistik mit $\mu = 0$ (und $\beta = \frac{1}{k_B T}$)

Spezialisiere auf tiefe Temperaturen.
und den Betrag der Anregung bei kleinen $\underline{p}$ (bzw. kleinen $\underline{k}$)

$$\varepsilon(\underline{p}) = \hbar\omega_{\underline{p}} = \underbrace{\gamma}_{\text{Proportionalitätsfaktor}} |\underline{p}|$$

mittlere Energie

$$\Rightarrow \quad \langle E \rangle = \ldots = \sim \underbrace{T}_{\text{Temperatur!}}{}^{4}$$

$$\Rightarrow C_V = \left.\frac{\partial E}{\partial T}\right|_V \sim T^3$$

Kubische Temperaturabhängigkeit!
entspricht dem Messergebnis z.B. für Helium-4

(Zum Vergleich: Das ideale Bose-Gas ist charakterisiert durch $C_V \sim T^{3/2}$ für tiefe Temperatur)