

Wkt. $\langle n_\alpha \rangle$ in einem 'Gemisch', repräsentiert durch statist. Operate $\hat{\rho} = \frac{1}{Z_{GH}} e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})}$

grosskanon. Ensemble
 $(\mu, T, V \text{ fest})$
 $\beta = \frac{1}{k_B T}$
 $Z_{GH} = \text{Tr} e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})}$
 "Trace" (Spur)

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

$\langle n_\alpha \rangle = \langle \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\alpha \rangle = \text{Tr} \hat{\rho} \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\alpha$
 Mittelwertbildung im grosskanon. Ensemble

$= \frac{1}{Z_{GH}} \text{Tr} e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\alpha$

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

man findet (siehe letzte VL): $e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} \hat{a}_\alpha^\dagger \equiv e^{-\beta(\epsilon_\alpha - \mu)} \hat{a}_\alpha^\dagger e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})}$

benutze $\hat{H} = \sum_\alpha \epsilon_\alpha \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\alpha$
 Energieerwartung

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

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

$\langle n_\alpha \rangle = \text{Tr} \hat{\rho} \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\alpha = \frac{1}{Z_{GH}} \text{Tr} \left(e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\alpha \right)$
 $\stackrel{\oplus}{=} \frac{1}{Z_{GH}} \text{Tr} \left(e^{-\beta(\epsilon_\alpha - \mu)} \hat{a}_\alpha^\dagger e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} \hat{a}_\alpha \right)$

Zahl: kann vor die Spur gezogen werden!

$= \frac{1}{Z_{GH}} e^{-\beta(\epsilon_\alpha - \mu)} \text{Tr} \left(\hat{a}_\alpha^\dagger e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} \hat{a}_\alpha \right)$

Zahl: insinnig vor Spur

$\stackrel{\downarrow}{=} \frac{1}{Z_{GH}} e^{-\beta(\epsilon_\alpha - \mu)} \text{Tr} \left(\hat{a}_\alpha \hat{a}_\alpha^\dagger e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} \right)$

bis hierhin galt alles für Fermionen und Bosonen!

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{Z_{0k}} e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)} \text{Tr} \left(e^{-\beta(A - \mu N)} \hat{a}_k \hat{a}_k^\dagger \right) \\
 &= e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)} \text{Tr} \left(\hat{\rho} \hat{a}_k \hat{a}_k^\dagger \right) \\
 &= e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)} \left(\text{Tr} \hat{\rho} \pm \text{Tr} \hat{\rho} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \right) \\
 &= e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)} \left(1 \pm \langle \hat{n}_k \rangle \right)
 \end{aligned}$$

beachte
 $[\hat{a}_k, \hat{a}_k^\dagger]_{\pm} = 1$
 oberes Vorzeichen: Bosonen
 unteres " " : Fermionen

Insgesamt:

$$\langle \hat{n}_k \rangle = e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)} (1 \pm \langle \hat{n}_k \rangle)$$

Auflösen: $\langle \hat{n}_k \rangle (1 \mp e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)}) = e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)}$

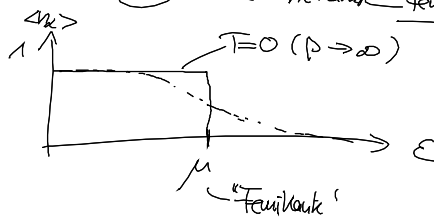
$$\Rightarrow \langle \hat{n}_k \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} \mp 1}$$

oberes Vorzeichen: Bosonen
 unteres " " : Fermionen

Bose-Einstein bzw. Fermi-Dirac-Statistik!

Bemerkung:

• 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 $\langle n_k \rangle$ kann Null werden $\Leftrightarrow \langle n_k \rangle$ kann unendlich groß werden

$$e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} - 1$$
 "Bose-Einstein-Kondensat"

Bose-Einstein

II.7 Exkurs: BE-Kondensat für ungeladene Bosonen

(VL Thermodynamik / Statist. Physik)

Was erwarten wir für tiefe T?

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

Wir erwarten also:

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

$$\langle \hat{n}_0 \rangle \sim N \quad \text{für } T \rightarrow 0$$

\swarrow Besetzungszahl des Grundzustands
 \searrow Gesamtteilchenzahl

"makroskopische" Besetzung des Grundzustands!

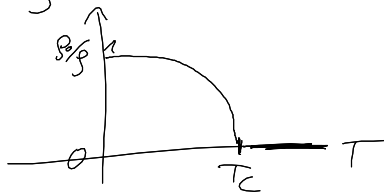
BE-Kondensat: Zwischen der Hochtemperaturphase (Teilchen über die Energie-Zustände verteilt) und der Besetzung des Grundzustands findet eine Art Phasenübergang statt

Chane-Wertigkeiten (für ideale, d.h. wechselwirkungslose Bosonensysteme)
 Teilchendichte $\frac{N}{V}$

$$S(T, \mu) = \begin{cases} S_n(T, \mu) = \sum_{k \neq 0} g_{\frac{3}{2}}(z) e^{-\beta \epsilon_k}, & T > T_c \\ S_0(T) + S_n(T, \mu=0) & T < T_c \end{cases}$$

- $\sum_{k \neq 0}$: Summ. Wellenlänge
 - $S_n(T, \mu)$: Funktion von T, μ
 - $S_0(T)$: Anteil des Kondensats, d.h. der Teilchen im Grundzustand
 - $S_n(T, \mu=0)$: Anteil der Bosonen in angeregten Zuständen

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



T_C bestimmt sich aus der Relation $\rho \lambda_T^3 = 2.612$

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

II.8. Wechselwirkende Bosonensysteme

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

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

Erweitern aus ebenen Wellen

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

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

Zweitglied aus ebenen Wellen im Volumen V

Fouriertransformation des Paarpotentials $V(\underline{r}_i - \underline{r}_j)$

typischerweise setzt man die Summen um:

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

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

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

Folgende Annahme:

Bei tiefen Temperaturen findet (wie beim idealen Bosegas!) eine makroskopische Besetzung des Grundzustands statt, also des Zustands

mit $\underline{k}=0$

(^{simultane} Annahme, falls schon Wechselwirkungen)

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

$$\text{also } N_0 = \langle \psi_0 | \overbrace{\hat{a}_{\underline{k}=0}^{\dagger} \hat{a}_{\underline{k}=0}} | \psi_0 \rangle$$

↳ Vielteilchenzustand bei $T=0$
Zur Teilchenzahl N_0

$$\sim N$$

↳ Gesamtteilchenzahl

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

betrachte übliche Relation für Erzeuger/Vertilger

$$\left. \begin{aligned} \hat{a}_{\underline{k}=0} | \psi_0 \rangle_{N_0} &= \sqrt{N_0} | \psi_0 \rangle_{N_0-1} \\ &\text{Vielteilchenzustand} \\ &\text{(zur Teilchenzahl } N_0) \\ \hat{a}_{\underline{k}=0}^{\dagger} | \psi_0 \rangle_{N_0} &= \sqrt{N_0+1} | \psi_0 \rangle_{N_0+1} \end{aligned} \right\} \left(\hat{a}_{\underline{k}=0} \hat{a}_{\underline{k}=0}^{\dagger} - \hat{a}_{\underline{k}=0}^{\dagger} \hat{a}_{\underline{k}=0} \right) | \psi_0 \rangle_{N_0} = (N_0+1 - N_0) | \psi_0 \rangle_{N_0}$$

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

$$\text{Damit: } \hat{a}_{\underline{k}=0}^{\dagger} \hat{a}_{\underline{k}=0} | \psi_0 \rangle_{N_0} = \hat{a}_{\underline{k}=0} \hat{a}_{\underline{k}=0}^{\dagger} | \psi_0 \rangle_{N_0} = N_0 | \psi_0 \rangle_{N_0}$$

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

Näherung!

Achtung: gilt nur 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 ersetzt

$$\textcircled{\neq} \quad \boxed{\hat{a}_{\underline{k}=0} = \hat{a}_{\underline{k}=0}^+ = \sqrt{N_0}} \quad \text{Bogoliubov-Verfahren}$$

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!

Einzelwertterm:

$$\begin{aligned} \sum_{\underline{k}} \epsilon_{\underline{k}} \hat{a}_{\underline{k}}^+ \hat{a}_{\underline{k}} &= \cancel{\epsilon_{\underline{k}=0} \hat{a}_{\underline{k}=0}^+ \hat{a}_{\underline{k}=0}} + \sum_{\substack{\underline{k} \neq 0 \\ \text{angeregte Zustände}}} \epsilon_{\underline{k}} \hat{a}_{\underline{k}}^+ \hat{a}_{\underline{k}} \\ &= \sum_{\underline{k} \neq 0} \epsilon_{\underline{k}} \hat{a}_{\underline{k}}^+ \hat{a}_{\underline{k}} \end{aligned}$$

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

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

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

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

Konstanten, wo 2 Erzeug- oder Vernichtoperatoren beim Wellenvektor 0 auftreten

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

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

⋮

ⓐ

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 $O(\sqrt{N_0})$ oder $O(1)$

Jetzt:

Wir vernachlässigen diese Terme gegenüber denen der Ordnung N_0 bzw. N_0^2 !
(im Zähler/Nennerbeitrag!)

Interpretation: Dadurch vernachlässige wir Wechselwirkung der angeregten Teilchen untereinander!
Wir behältten nur noch Wechselwirkung innerhalb des Kondensats und solche mit dem Kondensat

$$\Rightarrow \hat{H}_{\text{eff}} = \sum_{\underline{k} \neq 0} \left(\epsilon_{\underline{k}} + \frac{N_0}{V} \tilde{V}_0 + \frac{N_0}{V} \tilde{V}_{\underline{k}} \right) \tilde{a}_{\underline{k}}^+ \tilde{a}_{\underline{k}}$$

angeregte Zustände

$$+ \frac{N_0^2 \tilde{V}_0}{2V} + \sum_{\underline{k} \neq 0} \frac{N_0 \tilde{V}_{\underline{k}}}{2V} \left(\tilde{a}_{\underline{k}}^+ \tilde{a}_{-\underline{k}}^+ + \tilde{a}_{\underline{k}} \tilde{a}_{-\underline{k}} \right)$$

effektive Hamiltonian!

• erster Term $\left(\sum_{\underline{k} \neq 0} \dots \right)$ hat die Form eines effektiven Einzelteilchenhamiltonians!

- Zweiter Term: Konstante, hängt ab von der Dichte $\frac{N_0}{V}$
und von $\vec{V}_0 = \vec{V}_{\mu=0} \approx \int d\mu U(\mu)$
Wechselwirkungspotential

- dritter Term: Unbekannte Term!