

Bose-Einstein-Kondensation

Priv.-Doz. Dr. Axel Pelster

Arbeitsgruppe Professor Dr. Robert Graham
Fachbereich Physik
Universität Duisburg-Essen, Campus Essen



Vorlesung im Sommersemester 2004

Essen, Juli 2004

Inhaltsverzeichnis

I	Nicht wechselwirkende Quantengase	7
1	Statistische Mechanik	9
1.1	Ensemble-Theorie	9
1.2	Kanonisches Ensemble	11
1.3	Großkanonisches Ensemble	12
2	Quantenstatistik eines Teilchens	15
2.1	Klassische Statistik	15
2.2	Dichteoperator	16
2.3	Wick-Rotation	18
2.4	Zeitentwicklungsamplitude	20
2.5	Pfadintegral	22
2.6	Harmonische Zustandssumme	27
2.7	Harmonische Imaginärzeitentwicklungsamplitude	32
2.8	Semiklassische Näherung	36
3	Ideale Quantengase im kanonischen Ensemble	43
3.1	Identische Teilchen – Bosonen und Fermionen	43
3.2	Nichtwechselwirkende identische Teilchen	46
3.3	Quantenstatistik identischer Teilchen	49
3.4	Kanonische Zustandssumme	51
3.5	Rekursionsrelation	56
3.6	Freie Teilchen im Kasten	58
4	Ideale Quantengase im großkanonischen Ensemble	63
4.1	Großkanonische Zustandssumme	64

4.2	Schrödinger-Feldtheorie für Bosonen	66
4.3	Grassmann-Felder	68
4.4	Schrödinger-Feldtheorie für Fermionen	73
4.5	Funktionalintegral	74
4.6	Erzeugendes Funktional	79
4.7	Greensche Funktion	81
4.8	Semiklassische Näherung	84
4.9	Effektive Wirkung	85
4.10	Freies Bose-Gas	89
4.11	Bose-Gas in Harmonischer Falle	94
4.12	Anhang: Robinson-Formel	99
II	Schwach Wechselwirkende Quantengase	105
5	Streutheorie	107
5.1	Wechselwirkungspotentiale	107
5.2	Schwerpunktsystem	109
5.3	Freie Streulösungen	111
5.4	Harte Kugeln	113
5.5	Pseudopotentialmethode	114
5.6	Streuamplitude	116
5.7	Wirkungsquerschnitt	118
5.8	Partialwellen	119
5.9	Ununterscheidbare Teilchen	123
6	Thermodynamische Eigenschaften der Kondensate	125
6.1	Bose-Gas mit Wechselwirkung	125
6.2	Stirling-Formel	126
6.3	Effektives Potential in Klassischer Statistik	127
6.4	Background-Methode für Effektives Potential	129
6.5	Background-Methode für Effektive Wirkung	131
6.6	Bogoliubov-Theorie	135

6.7	Kurzreichweitige Wechselwirkung	138
6.8	Zeitunabhängige Gross-Pitaevskii-Gleichung	142
6.9	Qualitative Energetische Abschätzungen	144
6.10	Variationsverfahren	146
6.11	Thomas-Fermi-Näherung	148
6.12	Thomas-Fermi-Bogoliubov-Theorie	151
6.13	Anhang: Veltman-Regel	156
6.14	Anhang: Beta-Funktion	157
7	Dynamische Eigenschaften der Kondensate	159
7.1	Zeitabhängige Gross-Pitaevskii-Gleichung	159
7.2	Hydrodynamische Gleichungen	159
7.3	Elementare Anregungen	162
7.4	Isotrope Harmonische Falle	163
7.5	Variationsverfahren	166
7.6	Solitonen	171
8	Superfluidität	175
8.1	Bewegte Kondensate	175
8.2	Erweiterung der Thermodynamik	177
8.3	Background-Methode	178
8.4	Superfluide Dichte	181
8.5	Landau-Kriterium	184
9	Ungeordnete Bose-Gase	187
9.1	Zufallspotential	187
9.2	Replika-Methode	189
9.3	Background-Methode	191
9.4	Kondensatdichte	195
9.5	Innere Energie	197
9.6	Superfluide Dichte	198
	Literaturverzeichnis	203

Teil I

Nicht wechselwirkende Quantengase

Kapitel 1

Statistische Mechanik

Es ist das Ziel der statistischen Mechanik, die thermodynamischen Gesetze makroskopischer Körper aus den Eigenschaften ihrer atomaren Bestandteile abzuleiten. Hierbei sind die atomaren Bestandteile abhängig von der jeweiligen physikalischen Situation im Rahmen der klassischen Mechanik oder der Quantenmechanik zu beschreiben. Im folgenden wollen wir uns auf die Behandlung der Gleichgewichtsthermodynamik beschränken.

1.1 Ensemble-Theorie

In der statistischen Mechanik verwendet man auf makroskopischer Ebene im Prinzip meßbare, thermodynamische Variablen. Hierbei unterscheidet man zwischen intensiven Variablen, wie zum Beispiel der Temperatur T , dem Druck p oder dem chemischen Potential μ , und extensiven Variablen, wie zum Beispiel der Entropie S , dem Volumen V oder der Teilchenzahl N . Auf mikroskopischer Ebene dagegen verwendet man einen vollständigen Satz von mikroskopischen Variablen, die die theoretisch genaueste Zustandsbeschreibung eines Systems wiedergeben. In der klassischen Mechanik wird z.B. ein System aus Massenpunkten durch Angabe des Ortes und des Impulses jedes einzelnen Massenpunktes beschrieben. In der Quantenmechanik wird z.B. ein System aus Atomen durch Angabe der jeweiligen Quantenzahlen beschrieben.

Jeder Makrozustand kann durch eine Vielzahl von Mikrozuständen realisiert werden, d.h. bei bekanntem Makrozustand ist der vorliegende Mikrozustand unbekannt. Dieser mikroskopischen Unkenntnis wird in der statistischen Mechanik dadurch Rechnung getragen, daß man eine statistische Gesamtheit, also ein Ensemble, von gleichartigen Systemen betrachtet, die alle denselben Makrozustand aber unterschiedliche Mikrozustände besitzen. Thermodynamische Größen werden dabei mit Ensemblemittelwerten entsprechender physikalischer Größen identifiziert.

Von nun an nummerieren wir die einzelnen Mikrozustände mit ν und bezeichnen die Wahrscheinlichkeit, mit der ein Mikrozustand ν im Ensemble vertreten ist, mit p_ν . Die Verteilung dieser

Wahrscheinlichkeiten p_ν wird dann durch das folgende informationstheoretische Prinzip eindeutig bestimmt: Der Grad der Unbestimmtheit unter den Nebenbedingungen des vorgegebenen Makrozustandes soll ein Maximum haben. Das Unbestimmtheitsmaß ist dabei nach Boltzmann definiert durch

$$S = -k_B \sum_{\nu} p_{\nu} \ln p_{\nu}, \quad (1.1)$$

wobei die Wahrscheinlichkeiten p_ν nur unter Berücksichtigung der jeweiligen Nebenbedingungen zu variieren sind. So ist beispielsweise zu gewährleisten, daß die Wahrscheinlichkeiten p_ν normiert sind:

$$\sum_{\nu} p_{\nu} = 1. \quad (1.2)$$

Der Maximalwert des Unbestimmtheitsmaßes (1.1) wird dann mit der Entropie des Makrozustandes identifiziert.

Im folgenden beschränken wir unsere Überlegungen auf offene Systeme, die z.B. Wärme oder Teilchen mit der Umgebung austauschen können. Bei offenen Systemen unterscheidet man zwischen zwei verschiedenen Ensembles:

- Beim kanonischen Ensemble gibt die Umgebung in Form eines Wärmereservoirs die Temperatur T vor. Durch den Wärmeaustausch zwischen System und Wärmereservoir fluktuiert die Energie der Mikrozustände im Ensemble, wobei der Ensemblemittelwert der Energie

$$U = \sum_{\nu} p_{\nu} E_{\nu} \quad (1.3)$$

beim Maximalwert des Unbestimmtheitsmaßes (1.1) mit der inneren Energie des Makrozustandes identifiziert wird.

- Beim großkanonischen Ensemble besteht die Umgebung aus einem Wärme- und aus einem Teilchenreservoir, so daß sowohl die Temperatur T als auch das chemische Potential μ vorgegeben sind. Durch den Wärme- und Teilchenaustausch zwischen System und Umgebung fluktuieren Energie und Teilchenzahl der Mikrozustände im Ensemble. Die Ensemblemittelwerte der Energie (1.3) und der Teilchenzahl

$$N = \sum_{\nu} p_{\nu} N_{\nu} \quad (1.4)$$

charakterisieren den Makrozustand. Wird das Unbestimmtheitsmaß (1.1) maximal, so sind (1.3) und (1.4) mit der inneren Energie und der Teilchenzahl des Makrozustandes zu identifizieren.

Im Prinzip sind sowohl das kanonische als auch das großkanonische Ensemble in der Lage, die Thermodynamik eines Systems zu beschreiben. Im thermodynamischen Limes eines unendlich großen Systems müssen die thermodynamischen Resultate im kanonischen und im großkanonischen Ensemble übereinstimmen. Die Wahl eines Ensembles ist daher eher mehr eine Frage der Zweckmäßigkeit.

1.2 Kanonisches Ensemble

Die Maximalisierung des Unbestimmtheitsmaßes unter Berücksichtigung der Nebenbedingungen (1.2) und (1.3) für ein kanonisches Ensemble wird mit der Methode der Lagrangeschen Multiplikatoren durchgeführt. Hierzu multipliziert man die beiden Nebenbedingungen (1.2) und (1.3) mit den Lagrange-Multiplikatoren λ_1, λ_2 und addiert sie zum Unbestimmtheitsmaß (1.1):

$$S(\{p_\nu\}, \lambda_1, \lambda_2) = -k_B \sum_\nu p_\nu \ln p_\nu + \lambda_1 \left(1 - \sum_\nu p_\nu\right) + \lambda_2 \left(U - \sum_\nu p_\nu E_\nu\right). \quad (1.5)$$

Extremalisiert man (1.5) bezüglich der Lagrange-Multiplikatoren λ_1, λ_2 , so erhält man die beiden Nebenbedingungen zurück:

$$\frac{\partial S(\{p_\nu\}, \lambda_1, \lambda_2)}{\partial \lambda_1} = 0 \quad \Longrightarrow \quad (1.2),$$

$$\frac{\partial S(\{p_\nu\}, \lambda_1, \lambda_2)}{\partial \lambda_2} = 0 \quad \Longrightarrow \quad (1.3).$$

Die Extremalisierung von (1.5) bezüglich der Wahrscheinlichkeitsverteilung p_ν führt dagegen auf

$$\frac{\partial S(\{p_\nu\}, \lambda_1, \lambda_2)}{\partial p_\nu} = -k_B (\ln p_\nu + 1) - \lambda_1 - \lambda_2 E_\nu = 0. \quad (1.6)$$

Damit ist die Form der Wahrscheinlichkeitsverteilung p_ν festgelegt durch

$$p_\nu = \exp \left\{ -\frac{\lambda_1}{k_B} - 1 - \frac{\lambda_2}{k_B} E_\nu \right\}. \quad (1.7)$$

Die Normierungsbedingung (1.2) bestimmt den Lagrange-Multiplikator λ_1 . Definiert man die kanonische Zustandssumme

$$Z = \sum_\nu e^{-\lambda_2 E_\nu / k_B}, \quad (1.8)$$

so lautet die Wahrscheinlichkeitsbedingung

$$p_\nu = \frac{1}{Z} e^{-\lambda_2 E_\nu / k_B}. \quad (1.9)$$

und λ_1 bestimmt sich aus

$$Z = \exp \left\{ \frac{\lambda_1}{k_B} + 1 \right\}. \quad (1.10)$$

Setzt man (1.9) in das Argument des Logarithmus in (1.1) ein, so ergibt sich der Maximalwert des Unbestimmtheitsmaßes zu

$$S = \lambda_2 \sum_\nu p_\nu E_\nu + k_B \ln Z \sum_\nu p_\nu. \quad (1.11)$$

Durch die Verwendung der Nebenbedingungen (1.2) und (1.3) vereinfacht sich dies zu

$$-\frac{k_B}{\lambda_2} \ln Z = U - \frac{1}{\lambda_2} S. \quad (1.12)$$

Vergleicht man dieses Ergebnis der statistischen Mechanik mit der thermodynamischen Definition der freien Energie als Legendre transformierte der inneren Energie

$$F = U - TS, \quad (1.13)$$

so muß man den Lagrange-Multiplikator λ_2 mit der reziproken Temperatur

$$\lambda_2 = \frac{1}{T} \quad (1.14)$$

identifizieren. Außerdem ist die freie Energie proportional zum Logarithmus der Zustandssumme:

$$F = -k_B T \ln Z. \quad (1.15)$$

Wir erinnern uns daran, daß die Grundrelation der Thermodynamik für reversible Prozesse

$$dU = TdS - pdV + \mu dN \quad (1.16)$$

durch die Legendre-Transformation (1.13) übergeht in

$$dF = -SdT - pdV + \mu dN, \quad (1.17)$$

so daß die freie Energie die natürlichen Variablen

$$F = F(T, V, N) \quad (1.18)$$

besitzt. Ist die freie Energie eines Systems bekannt, so lassen sich aufgrund von (1.17) Entropie, Druck und chemisches Potential wie folgt berechnen:

$$S(T, V, N) = - \left. \frac{\partial F(T, V, N)}{\partial T} \right|_{V, N}, \quad (1.19)$$

$$p(T, V, N) = - \left. \frac{\partial F(T, V, N)}{\partial V} \right|_{T, N}, \quad (1.20)$$

$$\mu(T, V, N) = \left. \frac{\partial F(T, V, N)}{\partial N} \right|_{T, V}. \quad (1.21)$$

1.3 Großkanonisches Ensemble

Bei der Behandlung des großkanonischen Ensembles gehen wir genauso vor wie beim kanonischen Ensemble. Wir maximalisieren wieder das Unbestimmtheitsmaß (1.1), diesmal aber unter Berücksichtigung der Nebenbedingungen (1.2)–(1.4). Hierzu multiplizieren wir diese Nebenbedingungen mit Lagrange-Multiplikatoren $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ und addieren sie zum Unbestimmtheitsmaß (1.1):

$$\begin{aligned} S(\{p_\nu\}, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) &= -k_B \sum_\nu p_\nu \ln p_\nu + \lambda_1 \left(1 - \sum_\nu p_\nu \right) \\ &+ \lambda_2 \left(U - \sum_\nu p_\nu E_\nu \right) + \lambda_3 \left(N - \sum_\nu p_\nu N_\nu \right). \end{aligned} \quad (1.22)$$

Auch hier erhält man die drei Nebenbedingungen zurück, wenn man (1.22) bezüglich der Lagrange-Multiplikatoren $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ extremalisiert:

$$\frac{\partial S(\{p_\nu\}, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)}{\partial \lambda_1} = 0 \quad \Longrightarrow \quad (1.2),$$

$$\frac{\partial S(\{p_\nu\}, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)}{\partial \lambda_2} = 0 \quad \Longrightarrow \quad (1.3),$$

$$\frac{\partial S(\{p_\nu\}, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)}{\partial \lambda_3} = 0 \quad \Longrightarrow \quad (1.4).$$

Extremalisiert man dagegen (1.22) bezüglich der Wahrscheinlichkeitsverteilung p_ν , so erhält man

$$\frac{\partial S(\{p_\nu\}, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)}{\partial p_\nu} = -k_B (\ln p_\nu + 1) - \lambda_1 - \lambda_2 E_\nu - \lambda_3 N_\nu = 0. \quad (1.23)$$

Damit ist die Form der Wahrscheinlichkeitsverteilung festgelegt:

$$p_\nu = \exp \left\{ -\frac{\lambda_1}{k_B} - 1 - \frac{\lambda_2}{k_B} E_\nu - \frac{\lambda_3}{k_B} N_\nu \right\}. \quad (1.24)$$

Auch hier bestimmt die Normierungsbedingung (1.2) den Lagrange-Multiplikator λ_1 . Mit der großkanonischen Zustandssumme

$$\mathcal{Z} = \sum_\nu e^{-\lambda_2 E_\nu / k_B - \lambda_3 N_\nu / k_B} \quad (1.25)$$

lautet die Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$p_\nu = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\lambda_2 E_\nu / k_B - \lambda_3 N_\nu / k_B}, \quad (1.26)$$

wobei λ_1 gegeben ist durch

$$\mathcal{Z} = \exp \left\{ \frac{\lambda_1}{k_B} + 1 \right\}. \quad (1.27)$$

Setzt man (1.26) in das Argument des Logarithmus in (1.1) ein, so ergibt sich der Maximalwert des Unbestimmtheitsmaßes zu

$$S = \lambda_2 \sum_\nu p_\nu E_\nu + \lambda_3 \sum_\nu p_\nu N_\nu + k_B \ln \mathcal{Z} \sum_\nu p_\nu. \quad (1.28)$$

Durch die Nebenbedingungen (1.2)–(1.4) reduziert sich dies zu

$$-\frac{k_B}{\lambda_2} \ln \mathcal{Z} = U - \frac{1}{\lambda_2} S + \frac{\lambda_3}{\lambda_2} N. \quad (1.29)$$

Vergleicht man dieses Ergebnis der statistischen Mechanik mit der thermodynamischen Definition der großkanonischen freien Energie als zweifache Legendre transformierte der inneren Energie

$$\mathcal{F} = U - TS - \mu N, \quad (1.30)$$

so sind die beiden Lagrange-Multiplikatoren λ_2, λ_3 durch die Temperatur T und das chemische Potential μ gegeben:

$$\lambda_2 = \frac{1}{T}, \quad \lambda_3 = -\frac{\mu}{T}. \quad (1.31)$$

Außerdem ist die großkanonische freie Energie proportional zum Logarithmus der großkanonischen Zustandssumme:

$$\mathcal{F} = -k_B T \ln \mathcal{Z}. \quad (1.32)$$

Wir erinnern daran, daß die Grundrelation der Thermodynamik für reversible Prozesse (1.16) durch die zweifache Legendre-Transformation (1.30) übergeht in

$$d\mathcal{F} = -SdT - pdV - Nd\mu, \quad (1.33)$$

so daß die großkanonische freie Energie die natürlichen Variablen

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}(T, V, \mu) \quad (1.34)$$

besitzt. Ist die großkanonische freie Energie eines Systems bekannt, so lassen sich aufgrund von (1.33) Entropie, Druck und Teilchenzahl wie folgt berechnen:

$$S(T, V, \mu) = - \left. \frac{\partial \mathcal{F}(T, V, \mu)}{\partial T} \right|_{V, \mu}, \quad (1.35)$$

$$p(T, V, \mu) = - \left. \frac{\partial \mathcal{F}(T, V, \mu)}{\partial V} \right|_{T, \mu}, \quad (1.36)$$

$$N(T, V, \mu) = - \left. \frac{\partial \mathcal{F}(T, V, \mu)}{\partial \mu} \right|_{T, V}. \quad (1.37)$$

Kapitel 2

Quantenstatistik eines Teilchens

Das einfachste statistische System besteht aus einem Teilchen, das an ein Wärmebad gekoppelt wird. Es wird durch ein kanonisches Ensemble beschrieben, dessen Zustandssumme nach (1.8) und (1.14) gegeben ist durch

$$Z = \sum_{\nu} e^{-E_{\nu}/k_B T}, \quad (2.1)$$

während die Wahrscheinlichkeitsverteilung (1.9) einer Boltzmann-Verteilung entspricht:

$$p_{\nu} = \frac{1}{Z} e^{-E_{\nu}/k_B T}. \quad (2.2)$$

Liegt eine Observable O vor, die im Mikrozustand ν den Wert O_{ν} annimmt, so lautet der Ensemblemittelwert

$$\langle O \rangle = \sum_{\nu} p_{\nu} O_{\nu}, \quad (2.3)$$

der mit Hilfe von (2.1), (2.2) die folgende Form annimmt:

$$\langle O \rangle = \frac{\sum_{\nu} O_{\nu} e^{-E_{\nu}/k_B T}}{\sum_{\nu} e^{-E_{\nu}/k_B T}}. \quad (2.4)$$

Ein wichtiges Beispiel für eine solche Observable O ist die Energie E , deren Ensemblemittelwert gerade der inneren Energie (1.3) entspricht:

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_{\nu} E_{\nu} e^{-E_{\nu}/k_B T}}{\sum_{\nu} e^{-E_{\nu}/k_B T}} = U. \quad (2.5)$$

2.1 Klassische Statistik

Liegt ein klassisches Teilchen vor, so ist der Mikrozustand ν durch die Koordinate \mathbf{x} und den Impuls \mathbf{p} des Teilchens charakterisiert

$$\nu = (\mathbf{x}, \mathbf{p}) \quad (2.6)$$

und die Energie des Mikrozustandes durch die Hamilton-Funktion

$$E_\nu = H(\mathbf{x}, \mathbf{p}). \quad (2.7)$$

Die kanonische Zustandssumme (2.1) für ein solches klassisches Teilchen in D Dimensionen lautet

$$Z_{\text{cl}} = \int \frac{d^D x d^D p}{(2\pi\hbar)^D} e^{-H(\mathbf{x}, \mathbf{p})/k_B T}. \quad (2.8)$$

Dabei ist im Hinblick auf die Quantenmechanik schon berücksichtigt, daß der klassische Phasenraum aus Planck-Zellen der Größe $(2\pi\hbar)^D$ besteht, so daß ein Abzählen von Mikrozuständen möglich wird. Im Falle einer Hamilton-Funktion, die sich additiv aus kinetischer Energie und potentieller Energie zusammensetzt

$$H(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2M} + V(\mathbf{x}) \quad (2.9)$$

lassen sich die Impulsintegrale in (2.8) durchführen. Die kanonische Zustandssumme lautet dann

$$Z_{\text{cl}} = \int \frac{d^D x}{\lambda^D} e^{-\beta V(\mathbf{x})}, \quad (2.10)$$

wobei

$$\lambda = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2\beta}{M}} \quad (2.11)$$

die thermische de Broglie-Wellenlänge bezeichnet. Außerdem berechnet sich der Ensemblemittelwert (2.4) einer Observablen $O(\mathbf{x}, \mathbf{p})$ gemäß

$$\langle O \rangle_{\text{cl}} = \frac{\int \frac{d^D x d^D p}{(2\pi\hbar)^D} O(\mathbf{x}, \mathbf{p}) e^{-H(\mathbf{x}, \mathbf{p})/k_B T}}{\int \frac{d^D x d^D p}{(2\pi\hbar)^D} e^{-H(\mathbf{x}, \mathbf{p})/k_B T}}. \quad (2.12)$$

2.2 Dichteoperator

Liegt dagegen ein quantenmechanisches Teilchen vor, so ist der Mikrozustand ν mit den Quantenzahlen \mathbf{n} zu identifizieren:

$$\nu = \mathbf{n}. \quad (2.13)$$

Hierbei ergeben sich aus dem Eigenwertproblem des Hamilton-Operators \hat{H} die Eigenwerte $E_{\mathbf{n}}$ und die Eigenzustände $|\psi_{\mathbf{n}}\rangle$:

$$\hat{H}|\psi_{\mathbf{n}}\rangle = E_{\mathbf{n}}|\psi_{\mathbf{n}}\rangle. \quad (2.14)$$

Hierbei sei daran erinnert, daß die Eigenzustände $|\psi_{\mathbf{n}}\rangle$ der Orthonormalitätsrelation

$$\langle \psi_{\mathbf{n}} | \psi_{\mathbf{n}'} \rangle = \delta_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'} \quad (2.15)$$

und der Vollständigkeitsrelation

$$\sum_{\mathbf{n}} |\psi_{\mathbf{n}}\rangle \langle \psi_{\mathbf{n}}| = \hat{1} \quad (2.16)$$

genügen. Die kanonische Zustandssumme (2.1) für ein solches quantenmechanisches Teilchen lautet

$$Z = \sum_{\mathbf{n}} e^{-E_{\mathbf{n}}/k_B T}. \quad (2.17)$$

Vertauscht der Operator \hat{O} der Observablen O mit dem Hamilton-Operator \hat{H}

$$\left[\hat{O}, \hat{H} \right]_- = 0, \quad (2.18)$$

dann kann man die Eigenzustände $|\psi_{\mathbf{n}}\rangle$ von \hat{H} so wählen, daß sie gleichzeitig Eigenzustände von \hat{O} sind:

$$\hat{O}|\psi_{\mathbf{n}}\rangle = O_{\mathbf{n}}|\psi_{\mathbf{n}}\rangle. \quad (2.19)$$

Der Ensemblemittelwert (2.4) lautet in diesem Fall

$$\langle O \rangle = \frac{\sum_{\mathbf{n}} O_{\mathbf{n}} e^{-E_{\mathbf{n}}/k_B T}}{\sum_{\mathbf{n}} e^{-E_{\mathbf{n}}/k_B T}}. \quad (2.20)$$

Führt man die Spur eines Operators \hat{A} ein gemäß

$$\text{Tr}(\hat{A}) = \sum_{\mathbf{n}} \langle \psi_{\mathbf{n}} | \hat{A} | \psi_{\mathbf{n}} \rangle, \quad (2.21)$$

so entspricht die kanonische Zustandssumme (2.17) der Spur des Boltzmann-Faktors mit dem Hamilton-Operator \hat{H} :

$$Z = \text{Tr} \left(e^{-\hat{H}/k_B T} \right). \quad (2.22)$$

Entsprechend läßt sich auch der kanonische Ensemblemittelwert (2.20) mit Hilfe der Spur ausdrücken:

$$\langle O \rangle = \frac{\text{Tr} \left(\hat{O} e^{-\hat{H}/k_B T} \right)}{\text{Tr} \left(e^{-\hat{H}/k_B T} \right)}. \quad (2.23)$$

Wir bemerken, daß der kanonische Ensemblemittelwert durch (2.23) aber allgemeiner definiert ist als durch (2.20), da (2.23) auch dann verwendbar ist, wenn der Operator \hat{O} nicht mit dem Hamilton-Operator \hat{H} vertauscht. Im allgemeinen Fall erhalten wir aus (2.23) aufgrund von (2.14) und (2.21):

$$\langle O \rangle = \frac{\sum_{\mathbf{n}} \langle \psi_{\mathbf{n}} | \hat{O} | \psi_{\mathbf{n}} \rangle e^{-E_{\mathbf{n}}/k_B T}}{\sum_{\mathbf{n}} e^{-E_{\mathbf{n}}/k_B T}}. \quad (2.24)$$

Definiert man den kanonischen Dichteoperator

$$\hat{\rho} = \frac{e^{-\hat{H}/k_B T}}{\text{Tr} \left(e^{-\hat{H}/k_B T} \right)}, \quad (2.25)$$

so lautet der kanonische Ensemblemittelwert (2.23)

$$\langle O \rangle = \text{Tr} \left(\hat{O} \hat{\rho} \right). \quad (2.26)$$

Offensichtlich erfüllt der kanonische Dichteoperator (2.25) die Normierung

$$\langle \hat{1} \rangle = 1. \quad (2.27)$$

2.3 Wick-Rotation

Eine wichtige Beobachtung ist nun, daß im kanonischen Ensemble der Boltzmann-Faktor

$$e^{-\hat{H}/k_B T} \quad (2.28)$$

auftritt, der formal dem quantenmechanischen Zeitentwicklungsoperator

$$e^{-i\hat{H}(t_b - t_a)/\hbar} \quad (2.29)$$

ähnelt. Offensichtlich gehen die beiden Exponentialfunktionen (2.28) und (2.29) durch eine Wick-Rotation

$$t_b - t_a = -i\hbar\beta \quad (2.30)$$

ineinander über, wobei für die reziproke Temperatur T die Abkürzung

$$\beta = \frac{1}{k_B T} \quad (2.31)$$

eingeführt wurde. Die Beobachtung (2.30) besagt, daß die Realzeitentwicklung eines quantenmechanischen Teilchens durch den Übergang zur Imaginärzeit mit dessen Gleichgewichtsthermodynamik in Beziehung gebracht werden kann.

Wir betrachten nun die Konsequenzen, die sich aus der Wick-Rotation (2.30) in der Ortsdarstellung ergeben. Dabei erinnern wir daran, daß der Übergang von der bisher verwendeten darstellungsfreien Formulierung der Quantenmechanik zur Ortsdarstellung dadurch bewerkstelligt wird, daß man als Basis die Eigenzustände $|\mathbf{x}\rangle$ des Ortsoperators $\hat{\mathbf{x}}$ verwendet:

$$\text{Eigenwertproblem:} \quad \hat{\mathbf{x}}|\mathbf{x}\rangle = \mathbf{x}|\mathbf{x}\rangle, \quad (2.32)$$

$$\text{Orthonormalität:} \quad \langle \mathbf{x}|\mathbf{x}'\rangle = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (2.33)$$

$$\text{Vollständigkeit:} \quad \int d^D x |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}| = \hat{1}. \quad (2.34)$$

In der Ortsdarstellung ist die Spur eines Operators definiert durch

$$\text{Tr} (\hat{A}) = \int d^D x \langle \mathbf{x} | \hat{A} | \mathbf{x} \rangle, \quad (2.35)$$

so daß sich zunächst (2.22) reduziert auf

$$Z = \int d^D x \langle \mathbf{x} | e^{-i\hat{H}(-i\hbar\beta)/\hbar} | \mathbf{x} \rangle. \quad (2.36)$$

Demnach tritt als Integrand von (2.36) die analytische Fortsetzung der Zeitentwicklungsamplitude

$$(\mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a) = \langle \mathbf{x}_b | e^{-i\hat{H}(t_b-t_a)/\hbar} | \mathbf{x}_a \rangle \quad (2.37)$$

von der Real- zur Imaginärzeit auf. Wir definieren daher die Imaginärzeitentwicklungsamplitude

$$(\mathbf{x}_b, \hbar\beta | \mathbf{x}_a, 0) = (\mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a) \Big|_{t_a=0}^{t_b=-i\hbar\beta}, \quad (2.38)$$

deren Spur die Zustandssumme ergibt:

$$Z = \int d^D x (\mathbf{x}, \hbar\beta | \mathbf{x}, 0). \quad (2.39)$$

Entsprechendes gilt auch für die Ortsdarstellung des Dichteoperators

$$\hat{\rho} = \int d^D x_b \int d^D x_a |\mathbf{x}_b\rangle \rho(\mathbf{x}_b, \mathbf{x}_a) \langle \mathbf{x}_a|, \quad (2.40)$$

dessen Matrixelemente

$$\rho(\mathbf{x}_b, \mathbf{x}_a) = \langle \mathbf{x}_b | \hat{\rho} | \mathbf{x}_a \rangle \quad (2.41)$$

als Dichtematrix bezeichnet werden. Aus (2.25) folgt nämlich

$$\rho(\mathbf{x}_b, \mathbf{x}_a) = \frac{1}{Z} (\mathbf{x}_b, \hbar\beta | \mathbf{x}_a, 0). \quad (2.42)$$

Überführt man auch noch den Operator \hat{O} der Observablen O in die Ortsdarstellung

$$\hat{O} = \int d^D x_b \int d^D x_a |\mathbf{x}_b\rangle O(\mathbf{x}_b, \mathbf{x}_a) \langle \mathbf{x}_a|, \quad (2.43)$$

mit den Matrixelementen

$$O(\mathbf{x}_b, \mathbf{x}_a) = \langle \mathbf{x}_b | \hat{O} | \mathbf{x}_a \rangle, \quad (2.44)$$

so nimmt der kanonische Ensemblemittelwert (2.26) die folgende Form an

$$\langle O \rangle = \int d^D x_b \int d^D x_a O(\mathbf{x}_b, \mathbf{x}_a) \rho(\mathbf{x}_a, \mathbf{x}_b). \quad (2.45)$$

2.4 Zeitentwicklungsamplitude

Aufgrund der analytischen Fortsetzung (2.38) ist es sinnvoll, einige Eigenschaften der quantenmechanischen Zeitentwicklungsamplitude (2.37) zusammenzutragen. Wir bemerken zunächst, daß die Zeitentwicklungsamplitude $(\mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a)$ invariant unter einer gemeinsamen Translation der Zeitargumente t_b, t_a ist:

$$(\mathbf{x}_b, t_b + t_0 | \mathbf{x}_a, t_a + t_0) = (\mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a). \quad (2.46)$$

Hieraus folgt unmittelbar:

$$(\mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a) = (\mathbf{x}_b, t_b - t_a | \mathbf{x}_a, 0). \quad (2.47)$$

Außerdem gilt für die umgekehrte Zeitentwicklung vom Raum-Zeit-Punkt (\mathbf{x}_b, t_b) zum Raum-Zeit-Punkt (\mathbf{x}_a, t_a) :

$$(\mathbf{x}_a, t_a | \mathbf{x}_b, t_b) = (\mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a)^*. \quad (2.48)$$

Anschließend zeigen wir, daß die Zeitentwicklungsamplitude (2.37) einer partiellen Differentialgleichung genügt. Hierzu bemerken wir

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t_b} (\mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a) = \langle \mathbf{x}_b | \hat{H} e^{-i\hat{H}(t_b-t_a)/\hbar} | \mathbf{x}_a \rangle. \quad (2.49)$$

Wir betrachten einen Hamilton-Operator \hat{H} , der sich additiv aus Operatoren der kinetischen und der potentiellen Energie zusammensetzt:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2M} + V(\hat{\mathbf{x}}). \quad (2.50)$$

Da die Ortsdarstellung des Impulsoperators durch die Jordan-Regel gegeben ist

$$\langle \mathbf{x} | \hat{\mathbf{p}} = \frac{\hbar}{i} \nabla \langle \mathbf{x} |, \quad (2.51)$$

folgt für die Ortsdarstellung des Hamilton-Operators (2.50):

$$\langle \mathbf{x} | \hat{H} = \hat{H}(\mathbf{x}) \langle \mathbf{x} | \quad (2.52)$$

mit der Abkürzung

$$\hat{H}(\mathbf{x}) = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + V(\mathbf{x}). \quad (2.53)$$

Demnach ergibt sich aus (2.49) und (2.52), daß die Zeitentwicklungsamplitude (2.37) die Schrödinger-Gleichung erfüllt:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t_b} (\mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a) = \hat{H}(\mathbf{x}_b) (\mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a). \quad (2.54)$$

Damit die Zeitentwicklungsamplitude durch (2.54) eindeutig charakterisiert wird, benötigt man noch eine Anfangsbedingung. Diese folgt unmittelbar aus (2.33) und (2.37):

$$\lim_{t_b \rightarrow t_a} (\mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a) = \delta(\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a). \quad (2.55)$$

Wir bemerken, daß man mit Hilfe der Zeitentwicklungsamplitude (2.37) das Schrödinger-Anfangswertproblem für eine Wellenfunktion

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t_b} \psi(\mathbf{x}_b, t_b) = \hat{H}(\mathbf{x}_b) \psi(\mathbf{x}_b, t_b), \quad (2.56)$$

$$\psi(\mathbf{x}_a, t_a) = \psi_0(\mathbf{x}_a, t_a) \quad (2.57)$$

bis auf eine verbleibende Integration lösen kann. In der Tat erfüllt

$$\psi(\mathbf{x}_b, t_b) = \int d^D x_a (\mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a) \psi_0(\mathbf{x}_a, t_a) \quad (2.58)$$

das Anfangswertproblem (2.56), (2.57) aufgrund von (2.54), (2.55).

Eine weitere wichtige Eigenschaft der Zeitentwicklungsamplitude ist ihre Spektraldarstellung. Sie ergibt sich, wenn man in (2.37) die Vollständigkeitsrelation (2.16) der Eigenfunktionen $|\psi_{\mathbf{n}}\rangle$ des Hamilton-Operators verwendet:

$$(\mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a) = \sum_{\mathbf{n}} \langle \mathbf{x}_b | \psi_{\mathbf{n}} \rangle e^{-iE_{\mathbf{n}}(t_b - t_a)/\hbar} \langle \psi_{\mathbf{n}} | \mathbf{x}_a \rangle. \quad (2.59)$$

Wir führen nun die Ortsdarstellung der Eigenfunktionen

$$|\psi_{\mathbf{n}}\rangle = \int d^D x |\mathbf{x}\rangle \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) \quad (2.60)$$

mit den Wellenfunktionen

$$\psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | \psi_{\mathbf{n}} \rangle \quad (2.61)$$

ein. Dann gehen (2.14)–(2.16) in der Ortsdarstellung über in

$$\hat{H}(\mathbf{x}) \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) = E_{\mathbf{n}} \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}), \quad (2.62)$$

$$\int d^D x \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) \psi_{\mathbf{n}'}^*(\mathbf{x}) = \delta_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'}, \quad (2.63)$$

$$\sum_{\mathbf{n}} \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) \psi_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{x}') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (2.64)$$

Damit folgt aus (2.59) die gesuchte Spektraldarstellung

$$(\mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a) = \sum_{\mathbf{n}} \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}_b) e^{-iE_{\mathbf{n}}(t_b - t_a)/\hbar} \psi_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{x}_a). \quad (2.65)$$

Sie besagt, daß man aus der Kenntnis der Energieeigenwerte $E_{\mathbf{n}}$ und der Energiewellenfunktionen $\psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x})$ die Zeitentwicklungsamplitude berechnen kann. Demnach beinhaltet die Zeitentwicklungsamplitude die Informationen über alle Spektraldaten des Hamilton-Operators.

Schließlich diskutieren wir noch die Gruppeneigenschaft der Zeitentwicklungsamplitude. Hierzu verwenden wir in (2.37) die Vollständigkeitsrelation (2.34) der Ortseigenfunktionen $|\mathbf{x}\rangle$

$$\langle \mathbf{x}_c, t_c | \mathbf{x}_a, t_a \rangle = \int d^D x_b \langle \mathbf{x}_c | e^{-i\hat{H}(t_c-t_b)/\hbar} | \mathbf{x}_b \rangle \langle \mathbf{x}_b | e^{-i\hat{H}(t_b-t_a)/\hbar} | \mathbf{x}_a \rangle \quad (2.66)$$

und erhalten somit

$$\langle \mathbf{x}_c, t_c | \mathbf{x}_a, t_a \rangle = \int d^D x_b \langle \mathbf{x}_c, t_c | \mathbf{x}_b, t_b \rangle \langle \mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a \rangle \quad (2.67)$$

unabhängig vom gewählten Zwischenpunkt t_b . Diese Gruppeneigenschaft ermöglicht es, für die Zeitentwicklungsamplitude ein Pfadintegral abzuleiten.

2.5 Pfadintegral

Die Feynmansche Formulierung der Quantenmechanik ist wesentlich durch den experimentellen Befund motiviert, daß die Beugung von Teilchen an einem Doppelspalt zu einem charakteristischen Interferenzmuster auf einem Schirm führt. Im Wellenbild läßt sich dieses Doppelspaltexperiment dadurch erklären, daß jeder der beiden unendlich dünnen Doppelspalte Ausgangspunkt für die Huygensche Elementarwelle eines komplexen Wellenfeldes ist. Die Interferenz dieser beiden Huygenschen Elementarwellen führt dann zum charakteristischen Interferenzmuster, das gerade das Betragsquadrat der Fouriertransformierten des Doppelspaltexperimentes darstellt. Im Teilchenbild hat das Doppelspaltexperiment die Konsequenz, daß ein Teilchen gleichzeitig durch beide Spalte hindurchtritt. Bei einem einzelnen Detektionsereignis auf dem Schirm läßt sich experimentell nicht feststellen, durch welchen der beiden Spalte das Teilchen hindurchtritt.

Nun wird das Doppelspaltexperiment zu einem Gedankenexperiment mit unendlich vielen Spalten bzw. mit einer Staffelung unendlich vieler Spalte erweitert. Demnach läßt sich die Propagation eines quantenmechanischen Teilchens zwischen zwei Raum-Zeit-Punkten dadurch beschreiben, daß es zur Interferenz aller möglichen Wege zwischen den beiden Raum-Zeit-Punkten kommt. Die mathematische Realisierung dieses Gedankenexperimentes führt auf das Feynmansche Pfadintegral, das die Zeitentwicklungsamplitude $\langle \mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a \rangle$ für den Übergang vom Raum-Zeit-Punkt (\mathbf{x}_a, t_a) zum Raum-Zeit-Punkt (\mathbf{x}_b, t_b) durch eine Summation über alle möglichen Wege zwischen diesen beiden Raum-Zeit-Punkten darstellt:

$$\langle \mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a \rangle = \int_{\mathbf{x}(t_a)=\mathbf{x}_a}^{\mathbf{x}(t_b)=\mathbf{x}_b} \mathcal{D}\mathbf{x} e^{i\mathcal{A}[\mathbf{x}]/\hbar}. \quad (2.68)$$

Dabei wird über eine oszillierende Exponentialfunktion aufsummiert, deren Phase vom Verhältnis der klassischen Wirkung

$$\mathcal{A}[\mathbf{x}] = \int_{t_a}^{t_b} dt \left\{ \frac{M}{2} \dot{\mathbf{x}}^2(t) - V(\mathbf{x}(t)) \right\} \quad (2.69)$$

zum Planckschen Wirkungsquantum \hbar bestimmt wird. Die Oszillationen werden im klassischen Limes $\hbar \rightarrow 0$ so stark, daß die meisten Wege in (2.68) destruktiv interferieren. Im Limes $\hbar \rightarrow 0$

trägt nach der Sattelpunktsnäherung nur der klassische Pfad $\mathbf{x}_{\text{cl}}(t)$ bei, da bei ihm die Wirkung $\mathcal{A}[\mathbf{x}]$ extremal wird

$$\left. \frac{\delta \mathcal{A}[\mathbf{x}]}{\delta \mathbf{x}(t)} \right|_{\mathbf{x}(t)=\mathbf{x}_{\text{cl}}(t)} = 0, \quad (2.70)$$

wobei die Randbedingungen

$$\mathbf{x}_{\text{cl}}(t_a) = \mathbf{x}_a, \quad \mathbf{x}_{\text{cl}}(t_b) = \mathbf{x}_b \quad (2.71)$$

zu beachten sind. Im Rahmen dieser Sattelpunktsnäherung läßt sich die Zeitentwicklungsamplitude $(\mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a)$ durch die klassische Wirkung (2.69) ausdrücken, die entlang des klassischen Pfades $\mathbf{x}_{\text{cl}}(t)$ ausgewertet ist:

$$\mathcal{A}(\mathbf{x}_b, t_b; \mathbf{x}_a, t_a) = \mathcal{A}[\mathbf{x}_{\text{cl}}]. \quad (2.72)$$

Dieser Zusammenhang wird durch die Van Vleck-Pauli-Morette-Formel [2, Kapitel 4] beschrieben:

$$(\mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a) \approx \sqrt{\frac{1}{(2\pi i \hbar)^D} \text{Det} \left[-\frac{\partial^2 \mathcal{A}(\mathbf{x}_b, t_b; \mathbf{x}_a, t_a)}{\partial x_a^i \partial x_b^j} \right]} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \mathcal{A}(\mathbf{x}_b, t_b; \mathbf{x}_a, t_a) \right\}. \quad (2.73)$$

Im Rahmen des Feynmanschen Pfadintegrals kann man demnach den Unterschied zwischen klassischer Mechanik und Quantenmechanik daran festmachen, daß ein klassisches Teilchen von allen möglichen Wegen nur den klassischen Weg auswählt, während ein quantenmechanisches Teilchen gleichzeitig alle möglichen Wege zurücklegt. In diesem Sinne stellt das Feynmansche Pfadintegral eine globale Formulierung der Quantenmechanik dar, während die Schrödinger-Gleichung wegen der auftretenden partiellen Ableitungen eine lokale Formulierung darstellt.

Wir leiten nun das Pfadintegral (2.68) für die Zeitentwicklungsamplitude (2.37) ab. Hierzu unterteilen wir das zugrunde liegende Zeitintervall $[t_a, t_b]$ in $N + 1$ äquidistante Teilintervalle mit der Breite

$$\epsilon = \frac{t_b - t_a}{N + 1}, \quad (2.74)$$

den Stützpunkten

$$t_n = t_0 + \epsilon n; \quad n = 0, 1, \dots, N + 1 \quad (2.75)$$

und der Identifikation

$$t_0 \equiv t_a, \quad t_{N+1} \equiv t_b. \quad (2.76)$$

In (2.37) läßt sich der Zeitentwicklungsoperator (2.29) in $N + 1$ Faktoren zerlegen:

$$(\mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a) = \langle \mathbf{x}_b | e^{-i\hat{H}(t_{N+1}-t_N)/\hbar} e^{-i\hat{H}(t_N-t_{N-1})/\hbar} \dots e^{-i\hat{H}(t_2-t_1)/\hbar} e^{-i\hat{H}(t_1-t_0)/\hbar} | \mathbf{x}_a \rangle. \quad (2.77)$$

Zwischen die $N+1$ Exponentialfunktionen lassen sich N Vollständigkeitsrelationen (2.34) einfügen, so daß (2.77) übergeht in

$$(\mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a) = \left\{ \prod_{n=1}^N \int d^D x_n \right\} \left\{ \prod_{n=1}^{N+1} (\mathbf{x}_n, \epsilon | \mathbf{x}_{n-1}, 0) \right\}. \quad (2.78)$$

Hierbei wurde die Kurzzeitentwicklungsamplitude

$$(\mathbf{x}_n, \epsilon | \mathbf{x}_{n-1}, 0) = \langle \mathbf{x}_n | e^{-i\hat{H}\epsilon/\hbar} | \mathbf{x}_{n-1} \rangle \quad (2.79)$$

eingeführt und die Identifikation

$$\mathbf{x}_0 \equiv \mathbf{x}_a, \quad \mathbf{x}_{N+1} \equiv \mathbf{x}_b \quad (2.80)$$

vorgenommen. Im Grenzprozeß $\epsilon \rightarrow 0$, $N \rightarrow \infty$, $\epsilon(N+1) \rightarrow t_b - t_a$ einer unendlich feinen Zeitgitterung erhalten wir schließlich

$$(\mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ \prod_{n=1}^N \int d^D x_n \right\} \left\{ \prod_{n=1}^{N+1} (\mathbf{x}_n, \epsilon | \mathbf{x}_{n-1}, 0) \right\}. \quad (2.81)$$

Die Zeitentwicklungsamplitude (2.37) resultiert demnach aus Integralen über Produkten von Kurzzeitentwicklungsamplituden (2.79). Die explizite Form der Kurzzeitentwicklungsamplitude ergibt sich dadurch, daß man den Hamilton-Operator (2.50) verwendet:

$$(\mathbf{x}_n, \epsilon | \mathbf{x}_{n-1}, 0) = \langle \mathbf{x}_n | e^{-i\hat{\mathbf{p}}^2\epsilon/2M\hbar - iV(\hat{\mathbf{x}})\epsilon/\hbar} | \mathbf{x}_{n-1} \rangle. \quad (2.82)$$

Hierbei läßt sich die Baker-Campbell-Hausdorff-Formel [2, Anhang 2A]

$$e^{-i\hat{\mathbf{p}}^2\epsilon/2M\hbar - iV(\hat{\mathbf{x}})\epsilon/\hbar} = e^{-iV(\hat{\mathbf{x}})\epsilon/\hbar} e^{-i\hat{\mathbf{p}}^2\epsilon/2M\hbar} e^{-i\hat{X}/\hbar} \quad (2.83)$$

verwenden, bei der ein Operator \hat{X} von der Größenordnung $\mathcal{O}(\epsilon^2)$ auftritt, der durch geschachtelte Kommutatoren der Operatoren der kinetischen Energie $\hat{\mathbf{p}}^2/2M$ und der potentiellen Energie $V(\hat{\mathbf{x}})$ gegeben ist. Damit faktorisieren die Exponentialfunktionen in (2.82) näherungsweise:

$$(\mathbf{x}_n, \epsilon | \mathbf{x}_{n-1}, 0) \approx \langle \mathbf{x}_n | e^{-iV(\hat{\mathbf{x}})\epsilon/\hbar} e^{-i\hat{\mathbf{p}}^2\epsilon/2M\hbar} | \mathbf{x}_{n-1} \rangle. \quad (2.84)$$

Der dadurch entstandene Fehler von der Größenordnung ϵ^2 ist für den Grenzprozeß in (2.81) unerheblich. Zur weiteren Berechnung von (2.84) werden die Eigenzustände $|\mathbf{p}\rangle$ des Impulsoperators $\hat{\mathbf{p}}$ verwendet:

$$\text{Eigenwertproblem:} \quad \hat{\mathbf{p}}|\mathbf{p}\rangle = \mathbf{p}|\mathbf{p}\rangle, \quad (2.85)$$

$$\text{Orthonormalität:} \quad \langle \mathbf{p} | \mathbf{p}' \rangle = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'), \quad (2.86)$$

$$\text{Vollständigkeit:} \quad \int d^D p |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}| = \hat{1}. \quad (2.87)$$

Mit Hilfe der Vollständigkeitsrelation (2.87) erhalten wir nämlich

$$(\mathbf{x}_n, \epsilon | \mathbf{x}_{n-1}, 0) \approx \int d^D p_n \langle \mathbf{x}_n | \mathbf{p}_n \rangle \langle \mathbf{p}_n | \mathbf{x}_{n-1} \rangle e^{-iV(\mathbf{x}_n)\epsilon/\hbar} e^{-i\mathbf{p}_n^2\epsilon/2M\hbar}. \quad (2.88)$$

Für die Ortsdarstellung der Eigenzustände $|\mathbf{p}\rangle$

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle \quad (2.89)$$

erhalten wir mit Hilfe von (2.51) und (2.85) die Differentialgleichung

$$\frac{\hbar}{i} \nabla \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}) = \mathbf{p} \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}). \quad (2.90)$$

Sie wird unter Beachtung der Ortsdarstellung der Orthonormalitätsrelation (2.86)

$$\int d^D x \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}) \psi_{\mathbf{p}'}^*(\mathbf{x}) = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \quad (2.91)$$

durch ebene Wellen gelöst:

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}) = \frac{e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{D/2}}. \quad (2.92)$$

Demnach geht (2.88) über in das Fresnel-Integral

$$(\mathbf{x}_n, \epsilon | \mathbf{x}_{n-1}, 0) \approx e^{-iV(\mathbf{x}_n)\epsilon/\hbar} \int \frac{d^D p_n}{(2\pi\hbar)^D} e^{-i\mathbf{p}_n^2 \epsilon / 2M\hbar + i\mathbf{p}_n(\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_{n-1})/\hbar}. \quad (2.93)$$

Setzt man das Zwischenergebnis (2.93) in (2.81) ein, so erhält man das diskretisierte Pfadintegral im Phasenraum

$$(\mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ \prod_{n=1}^N \int d^D x_n \right\} \left\{ \prod_{n=1}^{N+1} \int \frac{d^D p_n}{(2\pi\hbar)^D} \right\} e^{i\mathcal{A}^{(N)}/\hbar} \quad (2.94)$$

mit der diskretisierten Wirkung

$$\mathcal{A}^{(N)} = \epsilon \sum_{n=1}^{N+1} \left\{ \mathbf{p}_n \frac{\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_{n-1}}{\epsilon} - \left[\frac{\mathbf{p}_n^2}{2M} + V(\mathbf{x}_n) \right] \right\}. \quad (2.95)$$

Im Kontinuumsimes entspricht (2.94) dem Pfadintegral

$$(\mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a) = \int_{\mathbf{x}(t_a)=\mathbf{x}_a}^{\mathbf{x}(t_b)=\mathbf{x}_b} \frac{\mathcal{D}'\mathbf{x}\mathcal{D}\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^D} e^{i\mathcal{A}[\mathbf{x},\mathbf{p}]/\hbar} \quad (2.96)$$

und (2.95) der Wirkung im Phasenraum

$$\mathcal{A}[\mathbf{x}, \mathbf{p}] = \int_{t_a}^{t_b} dt \left\{ \mathbf{p}(t) \dot{\mathbf{x}}(t) - \left[\frac{\mathbf{p}^2(t)}{2M} + V(\mathbf{x}(t)) \right] \right\}. \quad (2.97)$$

Dabei sollen die unterschiedlichen Symbole $\mathcal{D}'\mathbf{x}\mathcal{D}\mathbf{p}$ bei der Integration der Pfade im Phasenraum andeuten, daß beim diskretisierten Pfadintegral (2.94) ein D -dimensionales Raumintegral weniger auftritt als bei den Impulsintegralen. Berechnet man dagegen das Fresnel-Integral (2.93) zu

$$(\mathbf{x}_n, \epsilon | \mathbf{x}_{n-1}, 0) \approx \left(\frac{M}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{D/2} \exp \left\{ \frac{iM(\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_{n-1})^2}{2\hbar\epsilon} - \frac{i}{\hbar} V(\mathbf{x}_n)\epsilon \right\}, \quad (2.98)$$

so ergibt sich aus (2.81) schließlich die zeitgitterte Version des Pfadintegrals (2.68) im Konfigurationsraum

$$(\mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ \prod_{n=1}^N \int d^D x_n \right\} \left(\frac{M}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{D(N+1)/2} e^{i\mathcal{A}^{(N)}/\hbar}, \quad (2.99)$$

wobei $\mathcal{A}^{(N)}$ die zeitgitterte Wirkung (2.69) darstellt:

$$\mathcal{A}^{(N)} = \epsilon \sum_{n=1}^{N+1} \left\{ \frac{M}{2} \left(\frac{\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_{n-1}}{\epsilon} \right)^2 - V(\mathbf{x}_n) \right\}. \quad (2.100)$$

Wir beachten, daß in (2.99) ein im Limes $\epsilon \rightarrow 0$ divergierender Faktor $\epsilon^{-D(N+1)/2}$ auftritt, der erst durch Ausführung der N -fachen D -dimensionalen Raumintegrale kompensiert wird. Hierzu betrachten wir als Beispiel das freie Teilchen $V(\mathbf{x}) = 0$, bei dem folgendes Fresnel-Integral zu berechnen ist:

$$I_N = \left\{ \prod_{n=1}^N \int d^D x_n \right\} \left(\frac{M}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{D(N+1)/2} \exp \left\{ -\frac{M}{2i\hbar\epsilon} \sum_{n=1}^{N+1} (\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_{n-1})^2 \right\}. \quad (2.101)$$

Spaltet man das Fresnel-Integral über \mathbf{x}_N ab

$$I_N = \left\{ \prod_{n=1}^{N-1} \int d^D x_n \right\} \left(\frac{M}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{DN/2} \exp \left\{ -\frac{M}{2i\hbar\epsilon} \sum_{n=1}^{N-1} (\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_{n-1})^2 \right\} R_N, \quad (2.102)$$

so ergibt sich für den Rest

$$R_N = \int d^D x_N \left(\frac{M}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{D/2} \exp \left\{ -\frac{M}{2i\hbar\epsilon} [(\mathbf{x}_{N+1} - \mathbf{x}_N)^2 + (\mathbf{x}_N - \mathbf{x}_{N-1})^2] \right\} \quad (2.103)$$

durch quadratische Ergänzung das Resultat

$$R_N = \frac{1}{2^{D/2}} \exp \left\{ -\frac{M}{4i\hbar\epsilon} (\mathbf{x}_{N+1} - \mathbf{x}_{N-1})^2 \right\}. \quad (2.104)$$

Einsetzen von (2.104) in (2.102) zeigt die Veränderungen auf, die durch das Ausführen der Integration über \mathbf{x}_N eingetreten sind:

$$\begin{aligned} I_N &= \left\{ \prod_{n=1}^{N-1} \int d^D x_n \right\} \left(\frac{M}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{D(N-1)/2} \exp \left\{ -\frac{M}{2i\hbar\epsilon} \sum_{n=1}^{N-1} (\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_{n-1})^2 \right\} \\ &\quad \times \left(\frac{M}{2\pi i \hbar (2 \cdot \epsilon)} \right)^{D/2} \exp \left\{ -\frac{M}{2i\hbar (2 \cdot \epsilon)} (\mathbf{x}_{N+1} - \mathbf{x}_{N-1})^2 \right\}. \end{aligned} \quad (2.105)$$

Integriert man noch die restlichen $N - 1$ Raumintegrale auf dieselbe Weise aus, so erhält man

$$I_N = \left(\frac{M}{2\pi i \hbar (N+1)\epsilon} \right)^{D/2} \exp \left\{ -\frac{M}{2i\hbar (N+1)\epsilon} (\mathbf{x}_{N+1} - \mathbf{x}_0)^2 \right\}. \quad (2.106)$$

Mit Hilfe von (2.101), (2.106) führt das diskretisierte Pfadintegral (2.99), (2.100) für das freie Teilchen $V(\mathbf{x}) = 0$ zu dem Ergebnis, daß dessen Zeitentwicklungsamplitude

$$(\mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a) = \left(\frac{M}{2\pi i \hbar (t_b - t_a)} \right)^{D/2} \exp \left\{ \frac{iM(\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a)^2}{2\hbar(t_b - t_a)} \right\} \quad (2.107)$$

mit der Kurzzeitentwicklungsamplitude (2.98) übereinstimmt. Wir überlassen dem Leser den Nachweis, daß die Zeitentwicklungsamplitude des freien Teilchens (2.107) das Schrödingersche Anfangswertproblem (2.54), (2.55), die Spektralzerlegung (2.65) und die Gruppeneigenschaft (2.67) erfüllt.

Wir diskutieren nun die Konsequenzen der Wick-Rotation (2.30) für das Pfadintegral (2.68). Offenbar läßt sich auch die Imaginärzeitentwicklungsamplitude (2.38) aus einem Pfadintegral berechnen

$$(\mathbf{x}_b, \hbar\beta | \mathbf{x}_a, 0) = \int_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}_a}^{\mathbf{x}(\hbar\beta)=\mathbf{x}_b} \mathcal{D}\mathbf{x} e^{-\mathcal{A}[\mathbf{x}]/\hbar}. \quad (2.108)$$

Dabei ergibt sich aber aus (2.69) die euklidische Wirkung

$$\mathcal{A}[\mathbf{x}] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left\{ \frac{M}{2} \dot{\mathbf{x}}^2(\tau) + V(\mathbf{x}(\tau)) \right\}, \quad (2.109)$$

bei der die Hamilton-Funktion als Integrand auftritt. Setzt man das Pfadintegral (2.108) in (2.39) ein, so ergibt sich auch ein Pfadintegral für die Zustandssumme:

$$Z = \oint \mathcal{D}\mathbf{x} e^{-\mathcal{A}[\mathbf{x}]/\hbar}. \quad (2.110)$$

Hierbei lautet aber das Pfadintegralmaß

$$\oint \mathcal{D}\mathbf{x} = \int d^D x \int_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}}^{\mathbf{x}(\hbar\beta)=\mathbf{x}} \mathcal{D}\mathbf{x}, \quad (2.111)$$

d.h. es ist in (2.110) über alle periodischen Pfade $\mathbf{x}(\tau)$ aufzusummieren:

$$\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}(\hbar\beta). \quad (2.112)$$

2.6 Harmonische Zustandssumme

Als wichtiges Beispiel der Quantenstatistik eines einzelnen Teilchens berechnen wir im folgenden die Zustandssumme des eindimensionalen harmonischen Oszillators, der linear an eine äußere Quelle $j(\tau)$ ankoppelt. Hierzu haben wir das Pfadintegral

$$Z_\omega[j] = \oint \mathcal{D}x e^{-\mathcal{A}_\omega[x,j]/\hbar} \quad (2.113)$$

mit der euklidischen Wirkung

$$\mathcal{A}_\omega[x, j] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left\{ \frac{M}{2} \dot{x}^2(\tau) + \frac{M}{2} \omega^2 x^2(\tau) - j(\tau) x(\tau) \right\} \quad (2.114)$$

auszuwerten. Dabei sind alle Pfade $x(\tau)$ zu berücksichtigen, die bezüglich der Imaginärzeit τ die Periode $\hbar\beta$ besitzen. Diese Pfade besitzen eine Fourier-Zerlegung, die im Rahmen der Gleichgewichtsthermodynamik auch als Matsubara-Zerlegung bezeichnet wird:

$$x(\tau) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} x_m e^{-i\omega_m \tau}. \quad (2.115)$$

Hierbei stellen ω_m die Matsubara-Frequenzen

$$\omega_m = \frac{2\pi}{\hbar\beta} m; \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.116)$$

dar. Damit der Pfad (2.115) reell ist, müssen die Matsubara-Koeffizienten x_m der Symmetriebedingung

$$x_m = x_{-m}^* \quad (2.117)$$

genügen. Zerlegt man die Matsubara-Koeffizienten x_m in ihre Real- und Imaginärteile

$$x_m = \operatorname{Re} x_m + i \operatorname{Im} x_m, \quad (2.118)$$

so führt (2.117) auf

$$\operatorname{Re} x_{-m} = \operatorname{Re} x_m, \quad \operatorname{Im} x_{-m} = -\operatorname{Im} x_m, \quad m = \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (2.119)$$

wobei x_0 reell ist. Die Symmetriebedingung (2.117) besagt, daß sich die Matsubara-Koeffizienten x_m mit negativem m auf solche mit positivem m zurückführen lassen. Eine Integration über alle Pfade (2.115) entspricht damit gewöhnlichen Integralen über alle möglichen Freiheitsgrade der Matsubara-Koeffizienten x_m . Wir definieren daher das Pfadintegrationsmaß als

$$\oint \mathcal{D}x \equiv N_0 \int_{-\infty}^{+\infty} dx_0 \left\{ \prod_{m=1}^{\infty} N_m \int_{-\infty}^{+\infty} d \operatorname{Re} x_m \int_{-\infty}^{+\infty} d \operatorname{Im} x_m \right\}, \quad (2.120)$$

wobei wir die Normierungskonstanten N_0, N_m festlegen durch

$$N_0 = \sqrt{\frac{M}{2\pi\hbar^2\beta}}; \quad N_m = \frac{M\beta\omega_m^2}{\pi}, \quad m = 1, 2, \dots \quad (2.121)$$

Nun setzen wir die Matsubara-Zerlegung (2.115) in die harmonische Wirkung (2.114) ein und beachten bei der Ausführung der τ -Integration das Standardintegral

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau e^{-i\omega_m\tau} = \hbar\beta \delta_{m,0}. \quad (2.122)$$

Wir erhalten zunächst

$$\mathcal{A}_\omega[x, j] = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left\{ \hbar\beta \frac{M}{2} (\omega_m^2 + \omega^2) |x_m|^2 - \int_0^{\hbar\beta} d\tau j(\tau) e^{-i\omega_m\tau} x_m \right\}, \quad (2.123)$$

was sich mit der Zerlegung (2.118) und den Symmetriebedingungen (2.119) vereinfacht zu

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_\omega[x, j] &= \hbar\beta \frac{M}{2} \omega^2 x_0^2 - \int_0^{\hbar\beta} d\tau j(\tau) x_0 + \hbar\beta M \sum_{m=1}^{\infty} (\omega_m^2 + \omega^2) [(\operatorname{Re} x_m)^2 + (\operatorname{Im} x_m)^2] \\ &\quad - 2 \sum_{m=1}^{\infty} \int_0^{\hbar\beta} d\tau j(\tau) \left\{ \cos(\omega_m\tau) \operatorname{Re} x_m + \sin(\omega_m\tau) \operatorname{Im} x_m \right\}. \end{aligned} \quad (2.124)$$

Unter Verwendung von (2.120), (2.124) und (2.121) reduziert sich das Pfadintegral (2.113) auf Produkte gewöhnlicher Gauß-Integrale, die sich unmittelbar ausführen lassen. Das Ergebnis ist von der Form

$$Z_\omega[j] = Z_\omega \exp \left\{ \frac{1}{2\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' G_\omega^{(p)}(\tau, \tau') j(\tau) j(\tau') \right\}, \quad (2.125)$$

wobei sowohl die Zustandssumme ohne äußere Quelle

$$Z_\omega = \frac{1}{\hbar\beta\omega} \prod_{m=1}^{\infty} \frac{\omega_m^2}{\omega_m^2 + \omega^2} \quad (2.126)$$

als auch der Propagator

$$G_\omega^{(p)}(\tau, \tau') = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\omega_m(\tau-\tau')}}{M\beta(\omega_m^2 + \omega^2)} \quad (2.127)$$

eine Matsubara-Zerlegung besitzen. Wir bemerken, daß diese beiden Matsubara-Zerlegungen (2.126), (2.127) gemäß

$$\frac{\partial}{\partial\omega} \ln Z_\omega = -M\beta\omega G_\omega^{(p)}(\tau, \tau) \quad (2.128)$$

zueinander in Beziehung stehen.

Um Matsubara-Reihen von der Form (2.127) zu berechnen, verwendet man die Poissonsche Summenformel. Sie ergibt sich über die Feststellung, daß die Kammfunktion

$$K(x) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta(x - m) \quad (2.129)$$

periodisch ist:

$$K(x + k) = K(x); \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.130)$$

Deshalb läßt sich die Kammfunktion in eine Fourier-Reihe zerlegen

$$K(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} K_n e^{-2\pi i n x}, \quad (2.131)$$

wobei sich die Fourier-Koeffizienten K_n durch Integration über eine Periode ergeben. Es gilt also beispielsweise

$$K_n = \int_{-1/2}^{+1/2} dx K(x) e^{2\pi i n x}. \quad (2.132)$$

Einsetzen von (2.129) in (2.132) führt auf $K_n = 1$, so daß sich insgesamt die Distributionenidentität

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta(x - m) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-2\pi i n x} \quad (2.133)$$

ergibt. Multipliziert man (2.133) mit einer Funktion $f(x)$ und integriert über die gesamte reelle Achse, so folgt hieraus die Poissonsche Summenformel:

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} f(m) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) e^{-2\pi i n x}. \quad (2.134)$$

Spezialisiert man auf eine Funktion $f(m) = F(\omega_m)$, so geht (2.134) über in

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} F(\omega_m) = \frac{\hbar\beta}{2\pi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_m F(\omega_m) e^{-in\hbar\beta\omega_m}. \quad (2.135)$$

Im Hinblick auf eine erste Anwendung der Poissonsche Summenformel betrachten wir die Funktionen

$$x_m(\tau) = \frac{e^{-i\omega_m\tau}}{\sqrt{\hbar\beta}}, \quad (2.136)$$

die aufgrund von (2.122) der Orthonormalitätsrelation

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau x_m(\tau) x_{m'}^*(\tau) = \delta_{m,m'} \quad (2.137)$$

genügen. Durch Anwendung von (2.135) können wir dann zeigen, daß diese Funktionen (2.136) auch eine Vollständigkeitsrelation erfüllen:

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} x_m(\tau) x_m^*(\tau') = \delta^{(p)}(\tau - \tau'). \quad (2.138)$$

Hierbei bezeichnet $\delta^{(p)}(\tau - \tau')$ die periodisch repetierte Deltafunktion:

$$\delta^{(p)}(\tau - \tau') = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(\tau - \tau' + n\hbar\beta). \quad (2.139)$$

Demnach bilden die Funktionen (2.136) eine Basis im Raum der $\hbar\beta$ -periodischen Funktionen, was im nachhinein die Matsubara-Zerlegung (2.115) rechtfertigt. Außerdem bemerken wir, daß der Propagator $G_\omega^{(p)}(\tau, \tau')$ aufgrund der Matsubara-Zerlegung (2.127) die Differentialgleichung

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial\tau^2} + \omega^2\right) G_\omega^{(p)}(\tau, \tau') = \frac{\hbar}{M} \delta^{(p)}(\tau - \tau') \quad (2.140)$$

löst, bei der die periodisch repetierte Deltafunktion (2.139) als Inhomogenität auftritt. Man bezeichnet $G_\omega^{(p)}(\tau, \tau')$ deshalb auch als periodische Greensche Funktion des harmonischen Oszillators.

Wenden wir die Poissonsche Summenformel (2.135) in (2.127) an, so erhalten wir zunächst

$$G_\omega^{(p)}(\tau, \tau') = \sum_{n=-\infty}^{\infty} g_\omega(\tau - \tau' + n\hbar\beta), \quad (2.141)$$

wobei die Funktion $g_\omega(\tau)$ gegeben ist durch

$$g_\omega(\tau) = \frac{\hbar}{2\pi M} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_m \frac{e^{-i\omega_m\tau}}{\omega_m^2 + \omega^2}. \quad (2.142)$$

Das verbleibende ω_m -Integral läßt sich mit Hilfe des Residuensatzes berechnen. Es sei zunächst $\tau > 0$. Dann läßt sich (2.142) über einen Halbkreis in der unteren komplexen ω_m -Ebene berechnen. Der Integrand besitzt dort einen Pol an der Stelle $\omega_m = -i\omega$, so daß der Residuensatz auf

$$g_\omega(\tau) = \frac{\hbar}{2\pi M} (-2\pi i) \operatorname{Res}_{\omega_m = -i\omega} \frac{e^{-i\omega_m \tau}}{\omega_m^2 + \omega^2} = \frac{\hbar}{2M\omega} e^{-\omega\tau}, \tau > 0. \quad (2.143)$$

führt. Entsprechend ist für $\tau < 0$ der Halbkreis in der oberen komplexen ω_m -Ebene zu verwenden, wo ein Pol an der Stelle $\omega_m = i\omega$ auftritt:

$$g_\omega(\tau) = \frac{\hbar}{2\pi M} 2\pi i \operatorname{Res}_{\omega_m = i\omega} \frac{e^{-i\omega_m \tau}}{\omega_m^2 + \omega^2} = \frac{\hbar}{2M\omega} e^{\omega\tau}, \tau < 0. \quad (2.144)$$

Beide Fälle (2.143) und (2.144) lassen sich demnach zusammenfassen durch

$$g_\omega(\tau) = \frac{\hbar}{2M\omega} e^{-\omega|\tau|}. \quad (2.145)$$

Beim Einsetzen von (2.145) in (2.141) beachten wir, daß τ und τ' im Intervall $[0, \hbar\beta]$ liegen, so daß $|\tau - \tau'| \leq \hbar\beta$ ist. Wir erhalten deshalb

$$G_\omega^{(p)}(\tau, \tau') = \frac{\hbar}{2M\omega} \left\{ e^{-\omega|\tau - \tau'|} + \sum_{n=1}^{\infty} \left[e^{-\omega(\tau - \tau' + n\hbar\beta)} + e^{-\omega(\tau' - \tau + n\hbar\beta)} \right] \right\}. \quad (2.146)$$

Die Auswertung der geometrischen Reihe führt schließlich auf den Propagator

$$G_\omega^{(p)}(\tau, \tau') = \frac{\hbar}{2M\omega} \frac{\cosh \omega (|\tau - \tau'| - \hbar\beta/2)}{\sinh \hbar\beta\omega/2}. \quad (2.147)$$

Wir beobachten, daß (2.145) gerade den Tieftemperaturlimites des Propagators (2.147) darstellt:

$$g_\omega(\tau - \tau') = \lim_{\beta \rightarrow \infty} G_\omega^{(p)}(\tau, \tau'). \quad (2.148)$$

Demnach besagt (2.141), daß der Propagator $G_\omega(\tau, \tau')$ durch periodische Repetierung des Tieftemperaturpropagators $g_\omega(\tau - \tau')$ entsteht.

Die explizite Form des Propagators in (2.147) können wir nun verwenden, um auch die Zustandssumme ohne äußere Quelle (2.126) zu berechnen. Wir erhalten aus (2.128) und (2.147)

$$\frac{\partial}{\partial \omega} \ln Z_\omega = -\frac{\hbar\beta}{2} \coth \hbar\beta\omega/2, \quad (2.149)$$

so daß sich durch Integration zunächst

$$Z_\omega = \frac{C}{2 \sinh \hbar\beta\omega/2} \quad (2.150)$$

ergibt. Andererseits lesen wir aus der Matsubara-Zerlegung (2.126) ab

$$Z_\omega \rightarrow \frac{1}{\hbar\beta\omega}, \quad \omega \rightarrow 0, \quad (2.151)$$

so daß die Integrationskonstante in (2.150) zu $C = 1$ bestimmt werden muß. Damit lautet die harmonische Zustandssumme ohne äußere Quelle

$$Z_\omega = \frac{1}{2 \sinh \hbar\beta\omega/2}. \quad (2.152)$$

Es handelt sich hierbei tatsächlich um die korrekte Zustandssumme, da man aus (2.17) mit den Energieeigenwerten des harmonischen Oszillators

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (2.153)$$

die geometrische Reihe

$$Z_\omega = e^{-\hbar\beta\omega/2} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\hbar\beta\omega n} \quad (2.154)$$

erhält, die unmittelbar auf (2.152) führt. Dies rechtfertigt im nachhinein, daß wir die Normierungskonstanten N_0, N_m im Pfadintegralmaß (2.120) durch (2.121) festgelegt haben.

2.7 Harmonische Imaginärzeitentwicklungsamplitude

Wir wollen nun für den eindimensionalen harmonischen Oszillator, der linear an eine äußere Quelle ankoppelt, auch lokale Größen wie zum Beispiel die Dichtematrix berechnen. Deshalb wenden wir uns dem Pfadintegral für die Zeitentwicklungsamplitude zu

$$(x_b, t_b | x_a, t_a)[j] = \int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} \mathcal{D}x e^{i\mathcal{A}[x,j]/\hbar}, \quad (2.155)$$

wobei die klassische Wirkung gegeben ist durch

$$\mathcal{A}[x, j] = \int_{t_a}^{t_b} dt \left\{ \frac{M}{2} \dot{x}^2(t) - \frac{M}{2} \omega^2 x^2(t) + j(t) x(t) \right\} \quad (2.156)$$

und $j(t)$ die äußere Quelle bezeichnet. Es zeigt sich, daß für dieses System die Van Vleck-Pauli-Morette-Formel (2.73) exakt gültig ist:

$$(x_b, t_b | x_a, t_a)[j] = \sqrt{\frac{-1}{2\pi i \hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{A}(x_b, t_b; x_a, t_a)[j]}{\partial x_a \partial x_b}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \mathcal{A}(x_b, t_b; x_a, t_a)[j] \right\}. \quad (2.157)$$

Wir müssen daher die klassische Wirkung (2.156) entlang der klassischen Trajektorie $x_{cl}(t)$ auswerten:

$$\mathcal{A}(x_b, t_b; x_a, t_a)[j] = \mathcal{A}[x_{cl}, j]. \quad (2.158)$$

Dabei ist die klassische Trajektorie $x_{cl}(t)$ durch Extremalisierung der Wirkung

$$\left. \frac{\delta \mathcal{A}[x, j]}{\delta x(t)} \right|_{x(t)=x_{cl}(t)} = 0 \quad (2.159)$$

und die Randbedingungen

$$x_{\text{cl}}(t_a) = x_a, \quad x_{\text{cl}}(t_b) = x_b \quad (2.160)$$

bestimmt. Einsetzen von (2.156) in (2.159) führt auf eine lineare, inhomogene Differentialgleichung zweiter Ordnung:

$$\ddot{x}_{\text{cl}}(t) + \omega^2 x_{\text{cl}}(t) = \frac{j(t)}{M}. \quad (2.161)$$

Die allgemeine Lösung von (2.161) lautet

$$x_{\text{cl}}(t) = x_{\text{h}}(t) + x_{\text{p}}(t), \quad (2.162)$$

wobei $x_{\text{h}}(t)$ die homogene Lösung von

$$\ddot{x}_{\text{h}}(t) + \omega^2 x_{\text{h}}(t) = 0. \quad (2.163)$$

und $x_{\text{p}}(t)$ eine partikuläre Lösung darstellt:

$$\ddot{x}_{\text{p}}(t) + \omega^2 x_{\text{p}}(t) = \frac{j(t)}{M}. \quad (2.164)$$

Wählt man die homogene Lösung $x_{\text{h}}(t)$ so, daß die Randbedingungen

$$x_{\text{h}}(t_a) = x_a, \quad x_{\text{h}}(t_b) = x_b \quad (2.165)$$

gelten, dann folgt für die partikuläre Lösung $x_{\text{p}}(t)$:

$$x_{\text{p}}(t_a) = x_{\text{p}}(t_b) = 0. \quad (2.166)$$

Zunächst erhalten wir als Lösung von (2.163)

$$x_{\text{h}}(t) = c_1 \cos \omega t + c_2 \sin \omega t, \quad (2.167)$$

wobei die Einarbeitung der Randbedingungen (2.165) die Koeffizienten c_1, c_2 bestimmt:

$$c_1 = \frac{x_a \sin \omega t_b - x_b \sin \omega t_a}{\sin \omega(t_b - t_a)}, \quad c_2 = \frac{x_b \cos \omega t_a - x_a \cos \omega t_b}{\sin \omega(t_b - t_a)}. \quad (2.168)$$

Damit lautet die homogene Lösung von (2.163) und (2.165):

$$x_{\text{h}}(t) = \frac{x_b \sin \omega(t - t_a) + x_a \sin \omega(t_b - t)}{\sin \omega(t_b - t_a)}. \quad (2.169)$$

Eine partikuläre Lösung $x_{\text{p}}(t)$ läßt sich aufgrund der Linearität der Differentialgleichung (2.164) mit Hilfe der Greenschen Funktion $G(t, t')$ angeben:

$$x_{\text{p}}(t) = \int_{t_a}^{t_b} dt' G(t, t') \frac{j(t')}{M}. \quad (2.170)$$

Die Greensche Funktion erfüllt dabei wegen (2.164) die Differentialgleichung

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \omega^2 \right) G(t, t') = \delta(t - t') \quad (2.171)$$

und wegen (2.166) die Randbedingungen

$$G(t_a, t') = G(t_b, t') = 0. \quad (2.172)$$

Im Falle $t \neq t'$ werden (2.171), (2.172) gelöst durch

$$G(t, t') = \begin{cases} A(t') \sin \omega(t_b - t) & ; t > t' \\ B(t') \sin \omega(t - t_a) & ; t < t'. \end{cases} \quad (2.173)$$

Wir nehmen nun an, daß die Greensche Funktion $G(t, t')$ an der Stelle $t = t'$ stetig ist

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ G(t, t') \Big|_{t=t'+\epsilon} - G(t, t') \Big|_{t=t'-\epsilon} \right\} = 0, \quad (2.174)$$

so daß sich aus (2.173) die Bedingung

$$A(t') \sin \omega(t_b - t') - B(t') \sin \omega(t' - t_a) = 0 \quad (2.175)$$

ergibt. Dann besitzt die erste Ableitung der Greenschen Funktion $G(t, t')$ an der Stelle $t = t'$ einen Sprung. Eine Integration von (2.171) von $t = t' - \epsilon$ bis $t = t' + \epsilon$ führt auf die Sprungbedingung

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ \frac{\partial G(t, t')}{\partial t} \Big|_{t=t'+\epsilon} - \frac{\partial G(t, t')}{\partial t} \Big|_{t=t'-\epsilon} \right\} = 1, \quad (2.176)$$

was sich mit (2.173) auf die Gleichung

$$A(t') \cos \omega(t_b - t') + B(t') \cos \omega(t' - t_a) = -\frac{1}{\omega} \quad (2.177)$$

reduziert. Aus dem homogenen linearen Gleichungssystem (2.175), (2.177) folgt

$$A(t') = -\frac{\sin \omega(t' - t_a)}{\omega \sin \omega(t_b - t_a)}, \quad B(t') = -\frac{\sin \omega(t_b - t')}{\omega \sin \omega(t_b - t_a)}, \quad (2.178)$$

so daß die Greensche Funktion (2.173) lautet:

$$G(t, t') = -\frac{\Theta(t - t') \sin \omega(t_b - t) \sin \omega(t' - t_a) + \Theta(t' - t) \sin \omega(t_b - t') \sin \omega(t - t_a)}{\omega \sin \omega(t_b - t_a)}. \quad (2.179)$$

Nach (2.162), (2.169), (2.170) und (2.179) erhalten wir für die klassische Trajektorie

$$\begin{aligned} x_{\text{cl}}(t) &= \frac{x_b \sin \omega(t - t_a) + x_a \sin \omega(t_b - t)}{\sin \omega(t_b - t_a)} - \frac{1}{M\omega \sin \omega(t_b - t_a)} \int_{t_a}^{t_b} dt' j(t') \\ &\times \left[\Theta(t - t') \sin \omega(t_b - t) \sin \omega(t' - t_a) + \Theta(t' - t) \sin \omega(t_b - t') \sin \omega(t - t_a) \right]. \end{aligned} \quad (2.180)$$

Zur Berechnung von (2.158) müssen wir die klassische Wirkung (2.156) entlang dieser klassischen Trajektorie auswerten. Hierzu bemerken wir, daß (2.156) durch eine partielle Integration unter Beachtung von (2.160) und (2.161) übergeht in

$$\mathcal{A}(x_b, t_b; x_a, t_a)[j] = \frac{M}{2} [\dot{x}_{\text{cl}}(t_b)x_b - \dot{x}_{\text{cl}}(t_a)x_a] + \frac{1}{2} \int_{t_a}^{t_b} dt j(t) x_{\text{cl}}(t). \quad (2.181)$$

Die hierbei benötigten Geschwindigkeiten $\dot{x}_{\text{cl}}(t)$ der klassischen Trajektorie an den Randpunkten $t = t_b$, $t = t_a$ ergeben sich aus (2.180) zu

$$\begin{aligned}\dot{x}_{\text{cl}}(t_b) &= \frac{\omega[x_b \cos \omega(t_b - t_a) - x_a]}{\sin \omega(t_b - t_a)} + \frac{1}{M \sin \omega(t_b - t_a)} \int_{t_a}^{t_b} dt' \sin \omega(t' - t_a) j(t'), \\ \dot{x}_{\text{cl}}(t_a) &= \frac{\omega[x_b - x_a \cos \omega(t_b - t_a)]}{\sin \omega(t_b - t_a)} - \frac{1}{M \sin \omega(t_b - t_a)} \int_{t_a}^{t_b} dt' \sin \omega(t_b - t') j(t').\end{aligned}\quad (2.182)$$

Aus (2.180)–(2.182) ergibt sich damit die klassische Wirkung (2.158) unter Beachtung von (2.169):

$$\begin{aligned}\mathcal{A}(x_b, t_b; x_a, t_a)[j] &= \frac{M\omega}{2 \sin \omega(t_b - t_a)} [(x_b^2 + x_a^2) \cos \omega(t_b - t_a) - 2x_b x_a] \\ &\quad + \int_{t_a}^{t_b} dt x_{\text{h}}(t) j(t) + \frac{1}{2M} \int_{t_a}^{t_b} dt \int_{t_a}^{t_b} dt' G(t, t') j(t) j(t').\end{aligned}\quad (2.183)$$

Mit Hilfe der Van Vleck-Pauli-Morette Formel (2.157) folgt dann die gesuchte Zeitentwicklungsamplitude:

$$\begin{aligned}(x_b, t_b | x_a, t_a)[j] &= \sqrt{\frac{M\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega(t_b - t_a)}} \exp \left\{ \frac{iM\omega [(x_b^2 + x_a^2) \cos \omega(t_b - t_a) - 2x_b x_a]}{2\hbar \sin \omega(t_b - t_a)} \right\} \\ &\quad \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt x_{\text{h}}(t) j(t) + \frac{i}{2\hbar M} \int_{t_a}^{t_b} dt \int_{t_a}^{t_b} dt' G(t, t') j(t) j(t') \right\}.\end{aligned}\quad (2.184)$$

Führt man die Wick-Rotation analog zu (2.38) durch

$$(x_b, \hbar\beta | x_a, 0)[j] = (x_b, t_b | x_a, t_a)[j] \Big|_{t_a=0}^{t_b=-i\hbar\beta},\quad (2.185)$$

so läßt sich die Imaginärzeitentwicklungsamplitude des harmonischen Oszillators mit äußerer Quelle berechnen. Sie ist gemäß (2.155), (2.156) durch das Pfadintegral

$$(x_b, \hbar\beta | x_a, 0)[j] = \int_{x(0)=x_a}^{x(\hbar\beta)=x_b} \mathcal{D}x e^{-\mathcal{A}[x, j]/\hbar},\quad (2.186)$$

mit der euklidischen Wirkung (2.114) gegeben. Aus (2.184) und (2.185) lesen wir dann folgendes Resultat ab

$$\begin{aligned}(x_b, \hbar\beta | x_a, 0)[j] &= \sqrt{\frac{M\omega}{2\pi \hbar \sinh \hbar\beta\omega}} \exp \left\{ -\frac{M\omega [(x_b^2 + x_a^2) \cosh \hbar\beta\omega - 2x_b x_a]}{2\hbar \sinh \hbar\beta\omega} \right\} \\ &\quad \times \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau x_{\text{h}}(\tau) j(\tau) + \frac{1}{2\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' G_{\omega}^{(\text{D})}(\tau, \tau') j(\tau) j(\tau') \right\}.\end{aligned}\quad (2.187)$$

Hierbei bezeichnet $x_{\text{h}}(\tau)$ die Wick-Rotation des homogenen Pfades (2.169)

$$x_{\text{h}}(\tau) = x_{\text{h}}(t) \Big|_{t=-i\tau} = \frac{x_b \sinh \omega\tau + x_a \sinh \omega(\hbar\beta - \tau)}{\sinh \hbar\beta\omega}\quad (2.188)$$

und $G_{\omega}^{(\text{D})}(\tau, \tau')$ die Wick-Rotation der Greenschen Funktion (2.179)

$$\begin{aligned}G_{\omega}^{(\text{D})}(\tau, \tau') &= -\frac{i\hbar}{M} G(t, t') \Big|_{t=-i\tau}^{t'=-i\tau'} = \frac{\hbar}{M\omega \sinh \hbar\beta\omega} \left\{ \Theta(\tau - \tau') \sinh \omega(\hbar\beta - \tau) \sinh \omega\tau' \right. \\ &\quad \left. + \Theta(\tau' - \tau) \sinh \omega(\hbar\beta - \tau') \sinh \omega\tau \right\}.\end{aligned}\quad (2.189)$$

Wir bemerken, daß sich die Imaginärzeitentwicklungsamplitude (2.187) in die Zustandssumme (2.125) überführen läßt:

$$Z_\omega[j] = \int_{-\infty}^{\infty} dx (x, \hbar\beta|x, 0)[j]. \quad (2.190)$$

In der Tat führt das Einsetzen von (2.187)–(2.189) in (2.190) auf unser früheres Resultat (2.125) mit (2.147) und (2.152). Im Falle einer verschwindenden äußeren Quelle erhalten wir damit für die Dichtematrix (2.42) des harmonischen Oszillators

$$\rho_\omega(x_b, x_a) = \frac{1}{Z_\omega[0]} (x_b, \hbar\beta|x_a, 0)[0] \quad (2.191)$$

den Ausdruck

$$\rho_\omega(x_b, x_a) = \sqrt{\frac{M\omega}{\pi\hbar} \tanh \hbar\beta\omega/2} \exp \left\{ -\frac{M\omega [(x_b^2 + x_a^2) \cosh \hbar\beta\omega - 2x_b x_a]}{2\hbar \sinh \hbar\beta\omega} \right\}. \quad (2.192)$$

Deren Diagonalelemente stellen eine Gauß-Verteilung dar

$$\rho_\omega(x, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-x^2/2\sigma^2}, \quad (2.193)$$

deren Standardabweichung gegeben ist durch

$$\sigma^2 = \frac{\hbar}{2M\omega} \coth \hbar\beta\omega/2. \quad (2.194)$$

Im Hochtemperaturlimes $T \rightarrow \infty$ zeigt diese Standardabweichung das klassische Verhalten

$$\sigma^2 \rightarrow \frac{k_B T}{M\omega^2}, \quad T \rightarrow \infty. \quad (2.195)$$

2.8 Semiklassische Näherung

Wir kehren nun wieder zur Imaginärzeitentwicklungsamplitude eines Teilchens in D Raumdimensionen zurück, die durch das Pfadintegral (2.108) mit der euklidischen Wirkung (2.109) berechnet werden kann. Im folgenden wollen wir dieses Pfadintegral im Rahmen der sogenannten semiklassischen Näherung auswerten, d.h. wir beschränken uns auf solche Potentiale $V(\mathbf{x})$, die räumlich nur schwach variieren. In führender Ordnung reduziert sich dann (2.108) näherungsweise auf das Pfadintegral eines freien Teilchens.

Der Ausgangspunkt der semiklassischen Näherung besteht darin, daß wir den Pfad $\mathbf{x}(\tau)$ in (2.108) gemäß $\mathbf{x}(\tau) = \bar{\mathbf{x}} + \delta\mathbf{x}(\tau)$ in das Pfadmittel $\bar{\mathbf{x}} = (\mathbf{x}_b + \mathbf{x}_a)/2$ und in die Fluktuationen $\delta\mathbf{x}(\tau)$ zerlegen. Damit geht (2.108), (2.109) über in

$$(\mathbf{x}_b, \hbar\beta|\mathbf{x}_a, 0) = \int_{\delta\mathbf{x}(0)=-\Delta\mathbf{x}/2}^{\delta\mathbf{x}(\hbar\beta)=\Delta\mathbf{x}/2} \mathcal{D}\delta\mathbf{x} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{M}{2} \dot{\delta\mathbf{x}}^2(\tau) + V(\bar{\mathbf{x}} + \delta\mathbf{x}(\tau)) \right] \right\}, \quad (2.196)$$

wobei als Abkürzung $\Delta \mathbf{x} = \mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a$ eingeführt wurde. Für schwach räumlich variierende Potentiale ist es gerechtfertigt, den Potentialterm in (2.196) bezüglich der Fluktuationen $\delta \mathbf{x}(\tau)$ in eine Taylor-Reihe zu entwickeln:

$$V(\bar{\mathbf{x}} + \delta \mathbf{x}(\tau)) = V(\bar{\mathbf{x}}) + \partial_i V(\bar{\mathbf{x}}) \delta x_i(\tau) + \frac{1}{2} \partial_i \partial_j V(\bar{\mathbf{x}}) \delta x_i(\tau) \delta x_j(\tau) + \dots \quad (2.197)$$

Hierbei wird die Einsteinsche Summenkonvention verwendet, wonach über doppelt auftretende Indizes automatisch zu summieren ist. Setzt man (2.197) in (2.196) ein, so ist auch der Integrand des Pfadintegrals bezüglich der Fluktuationen $\delta \mathbf{x}(\tau)$ in eine Taylor-Reihe zu entwickeln:

$$\begin{aligned} (\mathbf{x}_b, \hbar\beta | \mathbf{x}_a, 0) &= e^{-\beta V(\bar{\mathbf{x}})} \int_{\delta \mathbf{x}(0) = -\Delta \mathbf{x}/2}^{\delta \mathbf{x}(\hbar\beta) = \Delta \mathbf{x}/2} \mathcal{D} \delta \mathbf{x} \left\{ 1 - \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\partial_i V(\bar{\mathbf{x}}) \delta x_i(\tau) \right. \right. \\ &+ \left. \frac{1}{2} \partial_i \partial_j V(\bar{\mathbf{x}}) \delta x_i(\tau) \delta x_j(\tau) + \dots \right] + \frac{1}{2\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \left[\partial_i V(\bar{\mathbf{x}}) \delta x_i(\tau) \partial_j V(\bar{\mathbf{x}}) \delta x_j(\tau') \right. \\ &+ \left. \dots \right] + \dots \left. \right\} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \frac{M}{2} \dot{\delta \mathbf{x}}^2(\tau) \right\}. \end{aligned} \quad (2.198)$$

Führt man die Imaginärzeitentwicklungsamplitude

$$(\Delta \mathbf{x}/2, \hbar\beta | -\Delta \mathbf{x}/2, 0) = \int_{\delta \mathbf{x}(0) = -\Delta \mathbf{x}/2}^{\delta \mathbf{x}(\hbar\beta) = \Delta \mathbf{x}/2} \mathcal{D} \delta \mathbf{x} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \frac{M}{2} \dot{\delta \mathbf{x}}^2(\tau) \right\} \quad (2.199)$$

und die Erwartungswerte

$$\langle \bullet \rangle = \frac{1}{(\Delta \mathbf{x}/2, \hbar\beta | -\Delta \mathbf{x}/2, 0)} \int_{\delta \mathbf{x}(0) = -\Delta \mathbf{x}/2}^{\delta \mathbf{x}(\hbar\beta) = \Delta \mathbf{x}/2} \mathcal{D} \delta \mathbf{x} \bullet \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \frac{M}{2} \dot{\delta \mathbf{x}}^2(\tau) \right\} \quad (2.200)$$

ein, dann reduziert sich (2.198) auf

$$\begin{aligned} (\mathbf{x}_b, \hbar\beta | \mathbf{x}_a, 0) &= e^{-\beta V(\bar{\mathbf{x}})} (\Delta \mathbf{x}/2, \hbar\beta | -\Delta \mathbf{x}/2, 0) \left\{ 1 - \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \partial_i V(\bar{\mathbf{x}}) \langle \delta x_i(\tau) \rangle - \frac{1}{2\hbar} \partial_i \partial_j V(\bar{\mathbf{x}}) \right. \\ &\times \left. \int_0^{\hbar\beta} d\tau \langle \delta x_i(\tau) \delta x_j(\tau) \rangle + \frac{1}{2\hbar^2} \partial_i V(\bar{\mathbf{x}}) \partial_j V(\bar{\mathbf{x}}) \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \langle \delta x_i(\tau) \delta x_j(\tau') \rangle + \dots \right\}. \end{aligned} \quad (2.201)$$

Sowohl die Imaginärzeitentwicklungsamplitude (2.199) als auch die Erwartungswerte (2.200) lassen sich aus dem erzeugenden Funktional des freien Teilchens bestimmen

$$(\Delta \mathbf{x}/2, \hbar\beta | -\Delta \mathbf{x}/2, 0)[\mathbf{j}] = \int_{\delta \mathbf{x}(0) = -\Delta \mathbf{x}/2}^{\delta \mathbf{x}(\hbar\beta) = \Delta \mathbf{x}/2} \mathcal{D} \delta \mathbf{x} \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{M}{2} \dot{\delta \mathbf{x}}^2(\tau) - \mathbf{j}(\tau) \delta \mathbf{x}(\tau) \right] \right\}, \quad (2.202)$$

dessen explizite Form aus (2.187)–(2.189) im Limes $\omega \downarrow 0$ abgelesen werden kann:

$$\begin{aligned} (\Delta \mathbf{x}/2, \hbar\beta | -\Delta \mathbf{x}/2, 0)[\mathbf{j}] &= \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{D/2} \exp \left\{ -\frac{M}{2\hbar^2\beta} \Delta \mathbf{x}^2 + \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left(\frac{\tau}{\hbar\beta} - \frac{1}{2} \right) \Delta \mathbf{x} \mathbf{j}(\tau) \right. \\ &+ \left. \frac{1}{2\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \frac{\Theta(\tau - \tau')(\hbar\beta - \tau)\tau' + \Theta(\tau' - \tau)(\hbar\beta - \tau')\tau}{M\beta} \mathbf{j}(\tau) \mathbf{j}(\tau') \right\}. \end{aligned} \quad (2.203)$$

Für die Imaginärzeitamplitude (2.199) erhalten wir demnach

$$(\Delta \mathbf{x}/2, \hbar\beta | -\Delta \mathbf{x}/2, 0) = \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{D/2} \exp \left\{ -\frac{M}{2\hbar^2\beta} \Delta \mathbf{x}^2 \right\}. \quad (2.204)$$

Die in (2.201) benötigten Erwartungswerte (2.200) ergeben sich gemäß

$$\langle \delta x_i(\tau) \rangle = \frac{1}{(\Delta \mathbf{x}/2, \hbar\beta | - \Delta \mathbf{x}/2, 0)} \hbar \frac{\delta}{\delta j_i(\tau)} (\Delta \mathbf{x}/2, \hbar\beta | - \Delta \mathbf{x}/2, 0) [\mathbf{j}] \Big|_{\mathbf{j}=0}, \quad (2.205)$$

$$\langle \delta x_i(\tau) \delta x_j(\tau') \rangle = \frac{1}{(\Delta \mathbf{x}/2, \hbar\beta | - \Delta \mathbf{x}/2, 0)} \hbar \frac{\delta}{\delta j_i(\tau)} \hbar \frac{\delta}{\delta j_j(\tau')} (\Delta \mathbf{x}/2, \hbar\beta | - \Delta \mathbf{x}/2, 0) [\mathbf{j}] \Big|_{\mathbf{j}=0} \quad (2.206)$$

und führen auf die Ausdrücke

$$\langle \delta x_i(\tau) \rangle = \left(\frac{\tau}{\hbar\beta} - \frac{1}{2} \right) \Delta x_i, \quad (2.207)$$

und

$$\begin{aligned} \langle \delta x_i(\tau) \delta x_j(\tau') \rangle &= \left(\frac{\tau}{\hbar\beta} - \frac{1}{2} \right) \left(\frac{\tau'}{\hbar\beta} - \frac{1}{2} \right) \Delta x_i \Delta x_j \\ &+ \frac{\Theta(\tau - \tau')(\hbar\beta - \tau)\tau' + \Theta(\tau' - \tau)(\hbar\beta - \tau')\tau}{M\beta} \delta_{ij}. \end{aligned} \quad (2.208)$$

Setzt man (2.204), (2.207), (2.208) in (2.201) ein, so treten die folgenden τ -Integrale auf:

$$\begin{aligned} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left(\frac{\tau}{\hbar\beta} - \frac{1}{2} \right) &= 0, \quad \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left(\frac{\tau}{\hbar\beta} - \frac{1}{2} \right)^2 = \frac{\hbar\beta}{12}, \quad \int_0^{\hbar\beta} d\tau (\hbar\beta - \tau) \tau = \frac{(\hbar\beta)^3}{6}, \\ \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \left[\Theta(\tau - \tau')(\hbar\beta - \tau)\tau' + \Theta(\tau' - \tau)(\hbar\beta - \tau')\tau \right] &= \frac{(\hbar\beta)^4}{12}. \end{aligned} \quad (2.209)$$

Das Ergebnis für die semiklassische Näherung der Imaginärzeitentwicklungsamplitude lautet:

$$\begin{aligned} (\mathbf{x}_b, \hbar\beta | \mathbf{x}_a, 0) &= \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{D/2} \exp \left\{ -\frac{M}{2\hbar^2\beta} \Delta \mathbf{x}^2 - \beta V(\bar{\mathbf{x}}) \right\} \left\{ 1 - \frac{\beta}{24} (\Delta \mathbf{x} \nabla)^2 V(\bar{\mathbf{x}}) \right. \\ &\left. - \frac{\hbar^2\beta^2}{12M} \Delta V(\bar{\mathbf{x}}) + \frac{\hbar^2\beta^3}{24M} [\nabla V(\bar{\mathbf{x}})]^2 + \dots \right\}. \end{aligned} \quad (2.210)$$

Für die Zustandssumme (2.39) erhalten wir dann

$$Z = \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{D/2} \int d^D x e^{-\beta V(\mathbf{x})} \left\{ 1 - \frac{\hbar^2\beta^2}{12M} \Delta V(\mathbf{x}) + \frac{\hbar^2\beta^3}{24M} [\nabla V(\mathbf{x})]^2 + \dots \right\}, \quad (2.211)$$

was sich durch partielle Integration im letzten Term reduziert auf

$$Z = \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{D/2} \int d^D x \left\{ 1 - \frac{\hbar^2\beta^2}{24M} \Delta V(\mathbf{x}) + \dots \right\} e^{-\beta V(\mathbf{x})}. \quad (2.212)$$

In führender Ordnung der semiklassischen Näherung ist demnach die Zustandssumme durch den klassischen Ausdruck (2.10), (2.11) gegeben. Die Quantenkorrekturen in (2.212) sind von der Ordnung \hbar^2 und hängen von der Krümmung $\Delta V(\mathbf{x})$ des Potentials ab. Wir bemerken, daß die semiklassische Näherung Ausgangspunkt für die Entwicklung des Thomas-Fermi-Modells des Atoms ist [2, Abschnitt 4.10].

Betrachten wir als Beispiel das Potential des anisotropen harmonischen Oszillators

$$V(\mathbf{x}) = \frac{M}{2} \sum_{i=1}^D \omega_i^2 x_i^2. \quad (2.213)$$

In der semiklassischen Näherung, daß alle Frequenzen $\omega_1, \dots, \omega_D$ sehr klein sind, erhalten wir aus (2.212) das Ergebnis

$$Z = \frac{1}{(\hbar\beta\tilde{\omega})^D} \left\{ 1 - \frac{D\hbar^2\beta^2\overline{\omega^2}}{24} + \dots \right\}, \quad (2.214)$$

wobei die Abkürzungen $\tilde{\omega}, \overline{\omega^2}$ gegeben sind durch

$$\tilde{\omega} = \left(\prod_{i=1}^D \omega_i \right)^{1/D}, \quad \overline{\omega^2} = \frac{1}{D} \sum_{i=1}^D \omega_i^2. \quad (2.215)$$

Die semiklassische Näherung (2.214) des anisotropen harmonischen Oszillators läßt sich aber auch auf anderen Wegen berechnen:

- Aus der Zustandssumme des eindimensionalen harmonischen Oszillators (2.152) erhalten wir

$$Z = \prod_{i=1}^D \frac{1}{2 \sinh \hbar\beta\omega_i/2}, \quad (2.216)$$

was sich durch Taylor-Entwicklung für kleine Frequenzen $\omega_1, \dots, \omega_D$ direkt auf (2.214) reduziert.

- Mit den Energieeigenwerten des eindimensionalen harmonischen Oszillators (2.153) läßt sich die Spektraldarstellung

$$Z = \prod_{i=1}^D \sum_{n_i=0}^{\infty} e^{-\hbar\beta\omega_i(n_i+1/2)} \quad (2.217)$$

ablesen. Für kleine Frequenzen $\omega_1, \dots, \omega_D$ sind die Abstände zwischen den Energieniveaus $\Delta E_i = \hbar\omega_i$ klein gegenüber der thermischen Energie $k_B T = 1/\beta$. In diesem Fall gehen die diskreten Energieniveaus gegen ein Quasikontinuum und die einzelnen Summen in (2.217) lassen sich durch Integrale approximieren. Dieser Grenzübergang wird durch die Euler-MacLaurin-Formel [4, Anhang 6C]

$$\sum_{n=a}^b f(n) = \int_a^b dx f(x) + \frac{f(b) + f(a)}{2} + \frac{f'(b) - f'(a)}{12} + \dots \quad (2.218)$$

beschrieben. Damit erhalten wir zunächst

$$Z = \prod_{i=1}^D e^{-\hbar\beta\omega_i/2} \left\{ \frac{1}{\hbar\beta\omega_i} + \frac{1}{2} + \frac{\hbar\beta\omega_i}{12} + \dots \right\}, \quad (2.219)$$

was durch Taylor-Entwicklung in den Frequenzen $\omega_1, \dots, \omega_D$ schließlich in (2.214) übergeht.

Falls für ein vorgegebenes Potential $V(\mathbf{x})$ weder die Zustandssumme noch die Energieeigenwerte exakt analytisch bekannt sind, dann läßt sich die semiklassische Zustandssumme dennoch gemäß (2.212) berechnen.

Ist die Zustandssumme $Z(\beta)$ eines quantenstatistischen Systems bekannt, so ergibt sich dessen Zustandsdichte $\rho(E)$ über eine analytische Fortsetzung gemäß

$$\rho(E) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi\hbar} e^{iEt/\hbar} Z\left(\frac{it}{\hbar}\right). \quad (2.220)$$

Aus (2.8) folgt demnach die klassische Zustandsdichte

$$\rho_{\text{cl}}(E) = \int \frac{d^D x d^D p}{(2\pi\hbar)^D} \delta(E - H(\mathbf{x}, \mathbf{p})) \quad (2.221)$$

und aus (2.17) die quantenmechanische Zustandsdichte

$$\rho(E) = \sum_{\mathbf{n}} \delta(E - E_{\mathbf{n}}). \quad (2.222)$$

Im Falle des anisotropen harmonischen Oszillators (2.213) erhalten wir mit den Energieeigenwerten (2.153)

$$\rho(E) = \sum_{n_1=0}^{\infty} \dots \sum_{n_D=0}^{\infty} \delta\left(E - \hbar\omega_1 n_1 - \dots - \hbar\omega_D n_D - \frac{D}{2}\hbar\bar{\omega}\right), \quad (2.223)$$

d.h. die quantenmechanische Zustandsdichte besteht aus einer Überlagerung von Deltafunktionen. Aus (2.9) und (2.213) ergibt sich die klassische Zustandsdichte (2.221) zu

$$\rho_{\text{cl}}(E) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi\hbar} e^{iEt/\hbar} \prod_{i=1}^D \int \frac{dx_i dp_i}{2\pi\hbar} \exp\left\{-\frac{it}{2\hbar M} p_i^2 - \frac{itM\omega_i^2}{2\hbar} x_i^2\right\}. \quad (2.224)$$

Berechnet man die Fresnel-Integrale im Phasenraum, so gilt

$$\rho_{\text{cl}}(E) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi\hbar} \frac{e^{iEt/\hbar}}{(it\tilde{\omega})^D}. \quad (2.225)$$

Das verbleibende Integral läßt sich mit Hilfe des Schwinger-Tricks

$$\frac{1}{a^z} = \frac{1}{\Gamma(z)} \int_0^{\infty} d\sigma \sigma^{z-1} e^{-\sigma a} \quad (2.226)$$

berechnen und wir erhalten

$$\rho_{\text{cl}}(E) = \frac{E^{D-1}}{\Gamma(D) (\hbar\tilde{\omega})^D}. \quad (2.227)$$

Mit der semiklassischen Näherung (2.214) der Zustandssumme erhalten wir für die Zustandsdichte (2.220) entsprechend

$$\rho(E) = \frac{1}{(\hbar\tilde{\omega})^D} \left\{ \frac{E^{D-1}}{\Gamma(D)} - \frac{D\hbar^2\bar{\omega}^2 E^{D-3}}{24\Gamma(D-2)} + \dots \right\}. \quad (2.228)$$

Demnach entspricht der führende Term in der semiklassischen Näherung der Zustandsdichte (2.228) gerade der klassischen Zustandsdichte (2.227).

Die im Rahmen der semiklassischen Näherung gewonnenen Resultate für die Zustandssumme (2.214) und die Zustandsdichte (2.228) des anisotropen harmonischen Oszillators (2.213) sind zwar die führenden Terme einer systematischen Entwicklung für kleine Frequenzen $\omega_1, \dots, \omega_D$. Beide Entwicklungen haben aber den Nachteil, daß sie negative Beiträge beinhalten. Es ist daher nicht sinnvoll, sie für alle Parameterwerte, wie zum Beispiel β oder E , auszuwerten. Wir können aber eine Umentwicklung dieser semiklassischen Näherungen angeben, bei der nur positive Beiträge in den entsprechenden Entwicklungen auftreten.

Hierzu betrachten wir unser früheres Zwischenresultat (2.219) für die Zustandssumme. Es motiviert, die Zustandssumme zu faktorisieren

$$Z = e^{-\beta E_0} \tilde{Z}, \quad (2.229)$$

wobei

$$E_0 = \frac{D\hbar\bar{\omega}}{2}, \quad \bar{\omega} = \frac{1}{D} \sum_{i=1}^D \omega_i \quad (2.230)$$

die Grundzustandsenergie bezeichnet und der Rest

$$\tilde{Z} = \frac{e^{D\hbar\beta\bar{\omega}/2}}{(\hbar\beta\bar{\omega})^D} \left\{ 1 - \frac{D\hbar^2\beta^2\bar{\omega}^2}{24} + \dots \right\} \quad (2.231)$$

für kleine Frequenzen $\omega_1, \dots, \omega_D$ entwickelt wird:

$$\tilde{Z} = \frac{1}{(\hbar\beta\bar{\omega})^D} \left\{ 1 + \frac{D\hbar\beta\bar{\omega}}{2} + \frac{D\hbar^2\beta^2(3D\bar{\omega}^2 - \bar{\omega}^2)}{24} + \dots \right\}. \quad (2.232)$$

Die Faktorisierung der Zustandssumme in (2.229) hat die Konsequenz, daß die Energie E in der Zustandsdichte (2.220) relativ zur Grundzustandsenergie E_0 auftritt:

$$\rho(E) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi\hbar} e^{i(E-E_0)t/\hbar} \tilde{Z} \left(\frac{it}{\hbar} \right). \quad (2.233)$$

Für den anisotropen harmonischen Oszillator erhalten wir aus (2.232) und (2.233):

$$\rho(E) = \frac{1}{(\hbar\bar{\omega})^D} \left\{ \frac{(E-E_0)^{D-1}}{\Gamma(D)} + \frac{D\hbar\bar{\omega}(E-E_0)^{D-2}}{2\Gamma(D-1)} + \frac{D\hbar^2(3D\bar{\omega}^2 - \bar{\omega}^2)(E-E_0)^{D-3}}{24\Gamma(D-2)} + \dots \right\}. \quad (2.234)$$

Kapitel 3

Ideale Quantengase im kanonischen Ensemble

Es zeigt sich, daß die quantenmechanischen Gesetze für Vielteilchensysteme nur unter der Annahme formuliert werden können, daß identische Teilchen ununterscheidbar sind. Es ist nämlich eine experimentelle Tatsache, daß sich identische quantenmechanische Teilchen immer gleich verhalten und durch keinerlei objektive Messung voneinander unterschieden werden können. Im folgenden untersuchen wir, welche Konsequenzen sich aus diesem fundamentalen Prinzip der Ununterscheidbarkeit identischer Teilchen ergeben.

3.1 Identische Teilchen – Bosonen und Fermionen

Physikalisch relevant sind die Erwartungswerte von Observablen. Das Prinzip der Ununterscheidbarkeit identischer Teilchen besagt dann, daß sich diese Erwartungswerte nicht ändern dürfen, wenn man in der N -Teilchen-Wellenfunktion die Nummerierung zweier Teilchen miteinander vertauscht:

$$\begin{aligned} & \int d^D x_1 \cdots \int d^D x_N \psi^*(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_j, \dots, \mathbf{x}_k, \dots, \mathbf{x}_N) \hat{O} \psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_j, \dots, \mathbf{x}_k, \dots, \mathbf{x}_N) \\ &= \int d^D x_1 \cdots \int d^D x_N \psi^*(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k, \dots, \mathbf{x}_j, \dots, \mathbf{x}_N) \hat{O} \psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k, \dots, \mathbf{x}_j, \dots, \mathbf{x}_N). \end{aligned} \quad (3.1)$$

Aus dieser Definitionsgleichung für ununterscheidbare identische Teilchen werden wir nun charakteristische Eigenschaften für die N -Teilchen-Wellenfunktionen $\psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)$ und für die Operatoren \hat{O} ableiten. Daß man in (3.1) die Gültigkeit der Erwartungswerte nur für die Vertauschung von zwei Teilchen fordert, bedeutet keine prinzipielle Einschränkung, da jede beliebige Permutation \hat{P} als Produkt von Transpositionen \hat{P}_{jk} darstellbar ist

$$\hat{P} = \prod \hat{P}_{jk}, \quad (3.2)$$

wobei die Wirkung von \hat{P}_{jk} definiert ist durch

$$\hat{P}_{jk} \psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_j, \dots, \mathbf{x}_k, \dots, \mathbf{x}_N) = \psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k, \dots, \mathbf{x}_j, \dots, \mathbf{x}_N). \quad (3.3)$$

Die Transposition \hat{P}_{jk} ist offenbar involutorisch, d.h. die zweimalige Anwendung der Transposition \hat{P}_{jk} führt wieder zur selben Wellenfunktion zurück:

$$\hat{P}_{jk} \hat{P}_{jk} = \hat{1} \quad \Rightarrow \quad \hat{P}_{jk} = \hat{P}_{jk}^{-1}. \quad (3.4)$$

Mit Hilfe des Transpositionsoperators \hat{P}_{jk} läßt sich die Definitionsgleichung (3.1) für identische Teilchen von der Ortsdarstellung in die darstellungsfreie Formulierung umschreiben:

$$\langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle = \langle \hat{P}_{jk} \psi | \hat{O} | \hat{P}_{jk} \psi \rangle = \langle \psi | \hat{P}_{jk}^\dagger \hat{O} \hat{P}_{jk} | \psi \rangle. \quad (3.5)$$

Aus der trivialen Zerlegung

$$\begin{aligned} \langle \varphi | \hat{O} | \psi \rangle &= \frac{1}{4} \left\{ \langle \varphi + \psi | \hat{O} | \varphi + \psi \rangle - \langle \varphi - \psi | \hat{O} | \varphi - \psi \rangle \right. \\ &\quad \left. + i \langle \varphi + i\psi | \hat{O} | \varphi + i\psi \rangle - i \langle \varphi - i\psi | \hat{O} | \varphi - i\psi \rangle \right\} \end{aligned} \quad (3.6)$$

folgt dann mit (3.5) eine Identität für beliebige Matrixelemente

$$\langle \varphi | \hat{O} | \psi \rangle = \langle \varphi | \hat{P}_{jk}^\dagger \hat{O} \hat{P}_{jk} | \psi \rangle \quad (3.7)$$

und damit eine Identität für Operatoren:

$$\hat{O} = \hat{P}_{jk}^\dagger \hat{O} \hat{P}_{jk}. \quad (3.8)$$

Setzt man hierin speziell $\hat{O} = \hat{P}_{jk}$ ein, so folgt mit der involutorischen Eigenschaft (3.4) die Hermiteizität

$$\hat{P}_{jk} = \hat{P}_{jk}^\dagger \quad (3.9)$$

und die Unitarität

$$\hat{P}_{jk}^{-1} = \hat{P}_{jk}^\dagger \quad (3.10)$$

des Transpositionsoperators \hat{P}_{jk} . Ferner folgt aus (3.8) und (3.10), daß jeder Operator \hat{O} mit dem Transpositionsoperator \hat{P}_{jk} kommutiert:

$$\left[\hat{P}_{jk}, \hat{O} \right]_- = \hat{P}_{jk} \hat{O} - \hat{O} \hat{P}_{jk} = 0. \quad (3.11)$$

Da dies insbesondere auch für den Hamilton-Operator $\hat{O} = \hat{H}$ gilt, gibt es N -Teilchen-Wellenfunktionen, die gleichzeitig Eigenfunktionen zum Hamilton-Operator \hat{H} und zu allen Transpositionsoperatoren \hat{P}_{jk} sind:

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle, \quad \hat{P}_{jk} |\psi\rangle = P_{jk} |\psi\rangle. \quad (3.12)$$

Aufgrund der Hermiteizität (3.9) des Transpositionsoperators \hat{P}_{jk} sind dessen Eigenwerte reell. Aus der involutorischen Eigenschaft (3.4) folgt ferner $P_{jk}^2 = 1$. Demnach sind die Eigenwerte des Transpositionsoperators \hat{P}_{jk} entweder $P_{jk} = 1$ oder $P_{jk} = -1$.

Es ist einsichtig, daß eine N -Teilchen-Wellenfunktion $\psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)$, die Eigenfunktion zu allen Transpositionsoperatoren \hat{P}_{jk} ist, immer denselben Eigenwert besitzt. Aus der Identität

$$\hat{P}_{1j} \hat{P}_{2k} \hat{P}_{12} \hat{P}_{2k} \hat{P}_{1j} \psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_j, \dots, \mathbf{x}_k, \dots, \mathbf{x}_N) = \hat{P}_{jk} \psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_j, \dots, \mathbf{x}_k, \dots, \mathbf{x}_N) \quad (3.13)$$

folgt die Operatorzerlegung

$$\hat{P}_{1j} \hat{P}_{2k} \hat{P}_{12} \hat{P}_{2k} \hat{P}_{1j} = \hat{P}_{jk}, \quad (3.14)$$

so daß sich für die entsprechenden Eigenwerte die Behauptung ergibt:

$$P_{jk} = P_{12}. \quad (3.15)$$

Identische Teilchen besitzen demnach entweder eine symmetrische ($\epsilon = +1$) oder eine antisymmetrische ($\epsilon = -1$) Wellenfunktion:

$$\hat{P}_{jk} |\psi^\epsilon\rangle = \epsilon |\psi^\epsilon\rangle. \quad (3.16)$$

Aus (3.9) und (3.16) folgt, daß symmetrische und antisymmetrische Wellenfunktionen zueinander stets orthogonal sind:

$$\langle \psi^- | \psi^+ \rangle = \langle \psi^- | \hat{P}_{jk} \psi^+ \rangle = \langle \hat{P}_{jk} \psi^- | \psi^+ \rangle = - \langle \psi^- | \psi^+ \rangle = 0. \quad (3.17)$$

Außerdem behalten identische Teilchen ihren Symmetriecharakter für alle Zeiten bei. Da der Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}(t_b, t_a)$ einen Anfangszustand $|\psi^{\epsilon_a}(t_a)\rangle$ mit einer definierten Symmetrie ϵ_a in einen Endzustand $|\psi^{\epsilon_b}(t_b)\rangle = \hat{U}(t_b, t_a) |\psi^{\epsilon_a}(t_a)\rangle$ mit einer definierten Symmetrie ϵ_b abbildet, folgt aus (3.11) und (3.16):

$$\epsilon_b |\psi^{\epsilon_b}(t_b)\rangle = \hat{P}_{jk} |\psi^{\epsilon_b}(t_b)\rangle = \hat{U}(t_b, t_a) \hat{P}_{jk} |\psi^{\epsilon_a}(t_a)\rangle = \epsilon_a |\psi^{\epsilon_b}(t_b)\rangle \quad \Rightarrow \quad \epsilon_b = \epsilon_a. \quad (3.18)$$

Als Ergebnis können wir daher festhalten, daß der Hilbert-Raum identischer Teilchen entweder nur symmetrische oder nur antisymmetrische Wellenfunktionen beinhaltet. In der relativistischen Quantenfeldtheorie wird gezeigt, welcher Hilbert-Raum für welchen Teilchentyp vorkommt. Nach dem Spin-Statistik-Theorem von Pauli werden identische Teilchen mit ganzzahligem Spin, die Bosonen, durch symmetrische Wellenfunktionen und identische Teilchen mit halbzahligen Spin, die Fermionen, durch antisymmetrische Wellenfunktionen beschrieben.

Wir bemerken, daß der Fall von $D = 2$ Raumdimensionen getrennt zu behandeln ist. Es stellt sich heraus, daß es in $D = 2$ Raumdimensionen nicht nur 2 Sorten identischer Teilchen sondern ein ganzes Kontinuum von Teilchensorten gibt. Diese sogenannten Anyons werden durch einen kontinuierlichen Parameter ϵ beschrieben, der zwischen den Bosonen $\epsilon = +1$ und den Fermionen $\epsilon = -1$ interpoliert. Physikalisch relevant sind die Anyons beispielsweise für das Verständnis des Quanten-Hall-Effektes. Eine Einführung in die Physik der Anyons findet sich im Lehrbuch [9].

3.2 Nichtwechselwirkende identische Teilchen

Im allgemeinen ist es sehr aufwendig, N -Teilchen-Wellenfunktionen unter Beachtung der Symmetrieeigenschaften zu berechnen. Das soll im folgenden am Beispiele nichtwechselwirkender identischer Teilchen illustriert werden. Hierzu ist die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) \psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = E \psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) \quad (3.19)$$

für einen Hamilton-Operator zu lösen, der sich additiv aus 1-Teilchen-Hamilton-Operatoren (2.53) zusammensetzt:

$$\hat{H}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = \sum_{\nu=1}^N \hat{H}(\mathbf{x}_\nu). \quad (3.20)$$

Demnach besitzen alle betrachteten Teilchen dieselbe Masse M und bewegen sich im selben äußeren Potential $V(\mathbf{x})$, so daß sie identische Teilchen darstellen. Wir gehen davon aus, daß die 1-Teilchen-Wellenfunktionen $\psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x})$ und die 1-Teilchen-Energien $E_{\mathbf{n}}$ als Lösungen der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung (2.62) in Abhängigkeit der Quantenzahlen \mathbf{n} bekannt sind und daß die $\psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x})$ eine orthonormale Basis im Sinne von (2.63), (2.64) darstellen.

Wären die Teilchen unterscheidbar, dann würden die Lösungen der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung (3.19) in die 1-Teilchen-Wellenfunktionen faktorisieren:

$$\psi_{\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_N}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = \prod_{\nu=1}^N \psi_{\mathbf{n}_\nu}(\mathbf{x}_\nu) \quad (3.21)$$

und die Gesamtenergie wäre die Summe der 1-Teilchen-Energien

$$E_{\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_N} = \sum_{n=1}^N E_{\mathbf{n}_\nu}. \quad (3.22)$$

Hierbei wollen wir der Einfachheit halber davon ausgehen, daß die besetzten 1-Teilchen-Zustände verschieden sind, d.h. daß $\mathbf{n}_\nu \neq \mathbf{n}_\mu$ für $\nu \neq \mu$ gilt. Aus der Orthonormalitäts- und Vollständigkeitsrelationen der 1-Teilchen-Wellenfunktionen (2.63), (2.64) würden dann unmittelbar entsprechende Relationen für die N -Teilchen-Wellenfunktionen (3.21) folgen:

$$\int d^D x_1 \cdots \int d^D x_N \psi_{\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_N}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) \psi_{\mathbf{n}'_1, \dots, \mathbf{n}'_N}^*(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = \delta_{\mathbf{n}_1, \mathbf{n}'_1} \cdots \delta_{\mathbf{n}_N, \mathbf{n}'_N}, \quad (3.23)$$

$$\sum_{\mathbf{n}_1} \cdots \sum_{\mathbf{n}_N} \psi_{\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_N}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) \psi_{\mathbf{n}'_1, \dots, \mathbf{n}'_N}^*(\mathbf{x}'_1, \dots, \mathbf{x}'_N) = \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_1) \cdots \delta(\mathbf{x}_N - \mathbf{x}'_N). \quad (3.24)$$

Da identische Teilchen aber ununterscheidbar sind, muß die N -Teilchen-Wellenfunktion symmetrisch bzw. antisymmetrisch sein. Hierzu wird der (Anti-)Symmetrisierungsoperator

$$\hat{S}^\epsilon = \sum_P \epsilon^{p(P)} \hat{P} \quad (3.25)$$

eingeführt, bei dem sich die Summation über alle Permutationen P erstreckt und $p(P)$ die Anzahl der Transpositionen einer Permutation gemäß der Zerlegung (3.2) bezeichnet. Multipliziert man einen Permutationsoperator \hat{P} in der Summe (3.25) mit einem einzelnen Transpositionsoperator \hat{P}_{jk} , so ergibt sich ein anderer Permutationsoperator $\hat{P}' = \hat{P}_{jk} \hat{P}$ der Summe mit $|p(P') - p(P)| = 1$. Dies hat folgende Konsequenz:

$$\hat{P}_{jk} \hat{S}^\epsilon = \epsilon \hat{S}^\epsilon. \quad (3.26)$$

Durch die Vorschrift

$$\psi_{\{\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_N\}}^\epsilon(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = N_{\{\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_N\}}^\epsilon \hat{S}^\epsilon \prod_{\nu=1}^N \psi_{\mathbf{n}_\nu}(\mathbf{x}_\nu) \quad (3.27)$$

werden wegen (3.26) aus den N -Teilchen-Wellenfunktionen (3.21) symmetrische ($\epsilon = +1$) und antisymmetrische ($\epsilon = -1$) N -Teilchen-Wellenfunktionen mit der Eigenschaft (3.16) konstruiert. Aufgrund des Prinzips der Ununterscheidbarkeit sind dabei die (anti-)symmetrischen N -Teilchen-Wellenfunktionen von der Reihenfolge der Quantenzahlen $\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_N$ unabhängig. Dies wird in (3.27) durch den Index $\{\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_N\}$ zum Ausdruck gebracht. Wir bemerken, daß die (anti-)symmetrische N -Teilchen-Wellenfunktion (3.27) aufgrund von (3.2), (3.3), (3.25) die explizite Form

$$\psi_{\{\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_N\}}^\epsilon(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = N_{\{\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_N\}}^\epsilon \sum_P \epsilon^{p(P)} \psi_{\mathbf{n}_1}(\mathbf{x}_{P(1)}) \cdots \psi_{\mathbf{n}_N}(\mathbf{x}_{P(N)}) \quad (3.28)$$

besitzt. Führt man die Ortskoordinaten $\mathbf{x}_{P(1)}, \dots, \mathbf{x}_{P(N)}$ in die Standardordnung $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N$ über, so gehen die Quantenzahlen $\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_N$ aufgrund von (3.2), (3.4) über in $\mathbf{n}_{P(1)}, \dots, \mathbf{n}_{P(N)}$:

$$\psi_{\{\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_N\}}^\epsilon(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = N_{\{\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_N\}}^\epsilon \sum_P \epsilon^{p(P)} \psi_{\mathbf{n}_{P(1)}}(\mathbf{x}_1) \cdots \psi_{\mathbf{n}_{P(N)}}(\mathbf{x}_N). \quad (3.29)$$

Demnach ist eine Vertauschung der Ortskoordinaten mit einer Vertauschung der Quantenzahlen gleichwertig.

Zunächst ist festzuhalten, daß die (anti-)symmetrischen N -Teilchen-Wellenfunktionen (3.27) auch der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung (3.19) mit dem Energieeigenwert (3.22) genügen. Dies folgt aus (3.11) und dem Umstand (3.2), daß jeder Permutationsoperator \hat{P} in der Summe (3.25) als Produkt von Transpositionsoperatoren darstellbar ist. Ferner ergibt sich aus (3.25) und (3.27) eine wichtige Beobachtung für die antisymmetrische N -Teilchen-Wellenfunktion:

$$\psi_{\{\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_N\}}^-(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = N_{\{\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_N\}}^- \sum_P (-1)^{p(P)} \psi_{\mathbf{n}_1}(\mathbf{x}_{P(1)}) \cdots \psi_{\mathbf{n}_N}(\mathbf{x}_{P(N)}). \quad (3.30)$$

Demnach läßt sich die antisymmetrische N -Teilchen-Wellenfunktion in Form einer Slater-Determinante darstellen:

$$\psi_{\{\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_N\}}^-(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = N_{\{\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_N\}}^- \begin{vmatrix} \psi_{\mathbf{n}_1}(\mathbf{x}_1) & \psi_{\mathbf{n}_1}(\mathbf{x}_2) & \cdots & \psi_{\mathbf{n}_1}(\mathbf{x}_N) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \psi_{\mathbf{n}_N}(\mathbf{x}_1) & \psi_{\mathbf{n}_N}(\mathbf{x}_2) & \cdots & \psi_{\mathbf{n}_N}(\mathbf{x}_N) \end{vmatrix}. \quad (3.31)$$

Sind zwei Zeilen $\mathbf{n}_j = \mathbf{n}_k$ oder zwei Spalten $\mathbf{x}_j = \mathbf{x}_k$ gleich, so verschwindet offenbar die antisymmetrische N -Teilchen-Wellenfunktion und damit die Wahrscheinlichkeit, einen solchen Zustand zu finden. Dies ist gerade die Aussage des fundamentalen Pauli-Prinzips, wonach zwei Fermionen weder ein- und denselben Zustand besetzen noch sich an ein- und demselben Ort aufhalten können. Entsprechende Einschränkungen gibt es nicht für Bosonen.

Es soll nun die Normierungskonstante $N_{\{\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_N\}}^\epsilon$ in (3.27) berechnet werden. Baut man gemäß (3.2) eine Permutation \hat{P} aus ihren Transpositionen \hat{P}_{jk} auf, so folgt durch Iteration von (3.26):

$$\hat{P} \hat{S}^\epsilon = \epsilon^{p(P)} \hat{S}^\epsilon. \quad (3.32)$$

Damit läßt sich das Skalarprodukt zwischen zwei (anti-)symmetrischen N -Teilchen-Wellenfunktionen (3.27) berechnen. Mit Hilfe von (3.2), (3.9) und (3.25) erhalten wir zunächst

$$\langle \psi_{\{\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_N\}}^\epsilon | \psi_{\{\mathbf{n}'_1, \dots, \mathbf{n}'_N\}}^\epsilon \rangle = N_{\{\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_N\}}^\epsilon \sum_P \epsilon^{2p(P)} \langle \psi_{\mathbf{n}_1} \cdots \psi_{\mathbf{n}_N} | \psi_{\{\mathbf{n}'_1, \dots, \mathbf{n}'_N\}}^\epsilon \rangle, \quad (3.33)$$

was sich aufgrund von $\epsilon = \pm 1$ reduziert auf

$$\langle \psi_{\{\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_N\}}^\epsilon | \psi_{\{\mathbf{n}'_1, \dots, \mathbf{n}'_N\}}^\epsilon \rangle = N_{\{\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_N\}}^\epsilon N! \langle \psi_{\mathbf{n}_1} \cdots \psi_{\mathbf{n}_N} | \psi_{\{\mathbf{n}'_1, \dots, \mathbf{n}'_N\}}^\epsilon \rangle. \quad (3.34)$$

Mit Hilfe von (3.23), (3.25) und (3.27) folgt dann

$$\langle \psi_{\{\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_N\}}^\epsilon | \psi_{\{\mathbf{n}'_1, \dots, \mathbf{n}'_N\}}^\epsilon \rangle = N_{\{\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_N\}}^\epsilon N_{\{\mathbf{n}'_1, \dots, \mathbf{n}'_N\}}^\epsilon N! \sum_P \epsilon^{p(P)} \delta_{\mathbf{n}_1, \mathbf{n}'_{P(1)}} \cdots \delta_{\mathbf{n}_N, \mathbf{n}'_{P(N)}}. \quad (3.35)$$

Fordert man die Orthonormalitätsrelation

$$\langle \psi_{\{\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_N\}}^\epsilon | \psi_{\{\mathbf{n}'_1, \dots, \mathbf{n}'_N\}}^\epsilon \rangle = \delta_{\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_N; \mathbf{n}'_1, \dots, \mathbf{n}'_N} \quad (3.36)$$

mit dem (anti-)symmetrischen Kronecker-Symbol

$$\delta_{\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_N; \mathbf{n}'_1, \dots, \mathbf{n}'_N}^\epsilon = \frac{1}{N!} \sum_P \epsilon^{p(P)} \delta_{\mathbf{n}_1, \mathbf{n}'_{P(1)}} \cdots \delta_{\mathbf{n}_N, \mathbf{n}'_{P(N)}}, \quad (3.37)$$

so folgt aus (3.35) für die Normierungskonstante

$$N_{\{\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_N\}}^\epsilon = \frac{1}{N!}. \quad (3.38)$$

Nun wird gezeigt, daß man mit Hilfe von (3.27) den gesamten Hilbert-Raum der (anti-)symmetrischen N -Teilchen-Wellenfunktionen aufspannen kann. Hierzu geht man von der Vollständigkeitsrelation (3.24) der N -Teilchen-Wellenfunktionen (3.21) aus und wendet zweimal den (Anti-)Symmetrisierungsoperator (3.25) an, einmal auf die Ortskoordinaten $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N$ und einmal auf die Ortskoordinaten $\mathbf{x}'_1, \dots, \mathbf{x}'_N$:

$$\begin{aligned} & \sum_P \sum_{P'} \epsilon^{p(P)+p(P')} \sum_{\mathbf{n}_1} \cdots \sum_{\mathbf{n}_N} \psi_{\mathbf{n}_1}(\mathbf{x}_{P(1)}) \cdots \psi_{\mathbf{n}_N}(\mathbf{x}_{P(N)}) \psi_{\mathbf{n}_1}^*(\mathbf{x}'_{P'(1)}) \cdots \psi_{\mathbf{n}_N}^*(\mathbf{x}'_{P'(N)}) \\ &= \sum_P \sum_{P'} \epsilon^{p(P)+p(P')} \delta(\mathbf{x}_{P(1)} - \mathbf{x}'_{P'(1)}) \cdots \delta(\mathbf{x}_{P(N)} - \mathbf{x}'_{P'(N)}). \end{aligned} \quad (3.39)$$

Auf der linken Seite werden die Ortskoordinaten $\mathbf{x}_{P(1)}, \dots, \mathbf{x}_{P(N)}$ bzw. $\mathbf{x}'_{P'(1)}, \dots, \mathbf{x}'_{P'(N)}$ in die Standardordnung $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N$ bzw. $\mathbf{x}'_1, \dots, \mathbf{x}'_N$ umgestellt. In Folge dessen werden aufgrund von (3.2), (3.4) die Quantenzahlen $\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_N$ zu $\mathbf{n}_{P(1)}, \dots, \mathbf{n}_{P(N)}$ bzw. $\mathbf{n}_{P'(1)}, \dots, \mathbf{n}_{P'(N)}$ umgestellt. Eine entsprechende Umsortierung auf der rechten Seite von $\mathbf{x}_{P(1)}, \dots, \mathbf{x}_{P(N)}$ zu $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N$ führt $\mathbf{x}'_{P'(1)}, \dots, \mathbf{x}'_{P'(N)}$ in $\mathbf{x}'_{P'(P(1))}, \dots, \mathbf{x}'_{P'(P(N))}$ über:

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{n}_1} \cdots \sum_{\mathbf{n}_N} \left\{ \sum_P \epsilon^{p(P)} \psi_{\mathbf{n}_{P(1)}}(\mathbf{x}_1) \cdots \psi_{\mathbf{n}_{P(N)}}(\mathbf{x}_N) \right\} & \left\{ \sum_{P'} \epsilon^{p(P')} \psi_{\mathbf{n}_{P'(1)}}(\mathbf{x}_1) \cdots \psi_{\mathbf{n}_{P'(N)}}(\mathbf{x}_N) \right\} \\ & = \sum_P \sum_{P'} \epsilon^{p(P)+p(P')} \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_{P'(P(1))}) \cdots \delta(\mathbf{x}_N - \mathbf{x}'_{P'(P(N))}). \end{aligned} \quad (3.40)$$

Auf der linken Seite kann man nun (3.25), (3.27), (3.38) verwenden. Gleichzeitig wird auf der rechten Seite die Summe über die Permutationen P' durch eine Summe über die Permutationen $P'' = P'P$ mit $p(P'') = p(P') + p(P)$ ersetzt und die Summe über die Permutationen P trivial ausgeführt. Man erhält dann insgesamt die Vollständigkeitsrelation

$$\sum_{\mathbf{n}_1} \cdots \sum_{\mathbf{n}_N} \psi_{\{\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_N\}}^\epsilon(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) \psi_{\{\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_N\}}^{\epsilon*}(\mathbf{x}'_1, \dots, \mathbf{x}'_N) = \delta^\epsilon(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N; \mathbf{x}'_1, \dots, \mathbf{x}'_N), \quad (3.41)$$

wobei analog zu (3.37) die (anti-)symmetrische Delta-Funktion

$$\delta^\epsilon(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N; \mathbf{x}'_1, \dots, \mathbf{x}'_N) = \frac{1}{N!} \sum_P \epsilon^{p(P)} \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_{P(1)}) \cdots \delta(\mathbf{x}_N - \mathbf{x}'_{P(N)}) \quad (3.42)$$

definiert ist.

3.3 Quantenstatistik identischer Teilchen

Wir entwickeln nun die Quantenstatistik nichtwechselwirkender identischer Teilchen. Hierzu stellen wir zunächst die Eigenschaften der 1-Teilchen-Imaginärzeitentwicklungsamplitude

$$(\mathbf{x}_b, \tau_b | \mathbf{x}_a, \tau_a) = \langle \mathbf{x}_b | e^{-\hat{H}(\tau_b - \tau_a)/\hbar} | \mathbf{x}_a \rangle \quad (3.43)$$

zusammen. Sie ergeben sich durch Wick-Rotation

$$(\mathbf{x}_b, \tau_b | \mathbf{x}_a, \tau_a) = (\mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a) \Big|_{t_a = -i\tau_a}^{t_b = -i\tau_b} \quad (3.44)$$

aus den in Abschnitt 2.4 diskutierten Eigenschaften der 1-Teilchen-Entwicklungsamplitude (2.37):

- Zeittranslation:

$$(\mathbf{x}_b, \tau_b + \tau_0 | \mathbf{x}_a, \tau_a + \tau_0) = (\mathbf{x}_b, \tau_b | \mathbf{x}_a, \tau_a) \quad (3.45)$$

- Schrödingersches Anfangswertproblem:

$$-\hbar \frac{\partial}{\partial \tau_b} (\mathbf{x}_b, \tau_b | \mathbf{x}_a, \tau_a) = \hat{H}(\mathbf{x}_b) (\mathbf{x}_b, \tau_b | \mathbf{x}_a, \tau_a) \quad (3.46)$$

$$\lim_{\tau_b \rightarrow \tau_a} (\mathbf{x}_b, \tau_b | \mathbf{x}_a, \tau_a) = \delta(\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a) \quad (3.47)$$

- Spektraldarstellung:

$$(\mathbf{x}_b, \tau_b | \mathbf{x}_a, \tau_a) = \sum_{\mathbf{n}} \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}_b) e^{-E_{\mathbf{n}}(\tau_b - \tau_a)/\hbar} \psi_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{x}_a) \quad (3.48)$$

- Gruppeneigenschaft:

$$(\mathbf{x}_c, \tau_c | \mathbf{x}_a, \tau_a) = \int d^D x_b (\mathbf{x}_c, \tau_c | \mathbf{x}_b, \tau_b) (\mathbf{x}_b, \tau_b | \mathbf{x}_a, \tau_a) \quad (3.49)$$

Wir betrachten nun N unterscheidbare Teilchen, deren Imaginärzeitentwicklungsamplitude die Spektraldarstellung

$$\begin{aligned} (\mathbf{x}_{1b}, \dots, \mathbf{x}_{Nb}, \tau_b | \mathbf{x}_{1a}, \dots, \mathbf{x}_{Na}, \tau_a) &= \sum_{\mathbf{n}_1} \cdots \sum_{\mathbf{n}_N} \psi_{\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_N}(\mathbf{x}_{1b}, \dots, \mathbf{x}_{Nb}) \\ &\times e^{-E_{\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_N}(\tau_b - \tau_a)/\hbar} \psi_{\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_N}^*(\mathbf{x}_{1a}, \dots, \mathbf{x}_{Na}) \end{aligned} \quad (3.50)$$

besitzt. Aufgrund von (3.21), (3.22) faktorisiert dann (3.50) in 1-Teilchen-Imaginärzeitentwicklungsamplituden (3.48) gemäß:

$$(\mathbf{x}_{1b}, \dots, \mathbf{x}_{Nb}, \tau_b | \mathbf{x}_{1a}, \dots, \mathbf{x}_{Na}, \tau_a) = (\mathbf{x}_{1b}, \tau_b | \mathbf{x}_{1a}, \tau_a) \cdots (\mathbf{x}_{Nb}, \tau_b | \mathbf{x}_{Na}, \tau_a). \quad (3.51)$$

Entsprechend definieren wir die Imaginärzeitentwicklungsamplitude für N ununterscheidbare Teilchen über die Spektraldarstellung

$$\begin{aligned} (\mathbf{x}_{1b}, \dots, \mathbf{x}_{Nb}, \tau_b | \mathbf{x}_{1a}, \dots, \mathbf{x}_{Na}, \tau_a)^\epsilon &= \sum_{\mathbf{n}_1} \cdots \sum_{\mathbf{n}_N} \psi_{\{\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_N\}}^\epsilon(\mathbf{x}_{1b}, \dots, \mathbf{x}_{Nb}) \\ &\times e^{-E_{\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_N}(\tau_b - \tau_a)/\hbar} \psi_{\{\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_N\}}^{\epsilon*}(\mathbf{x}_{1a}, \dots, \mathbf{x}_{Na}). \end{aligned} \quad (3.52)$$

Einsetzen von (3.22), (3.28), (3.38) führt zunächst auf

$$\begin{aligned} (\mathbf{x}_{1b}, \dots, \mathbf{x}_{Nb}, \tau_b | \mathbf{x}_{1a}, \dots, \mathbf{x}_{Na}, \tau_a)^\epsilon &= \frac{1}{N!^2} \sum_P \sum_{P'} \epsilon^{p(P)+p(P')} \sum_{\mathbf{n}_1} \cdots \sum_{\mathbf{n}_N} \\ &\times \psi_{\mathbf{n}_1}(\mathbf{x}_{P(1)b}) \cdots \psi_{\mathbf{n}_N}(\mathbf{x}_{P(N)b}) e^{-(E_{\mathbf{n}_1} + \dots + E_{\mathbf{n}_N})(\tau_b - \tau_a)/\hbar} \psi_{\mathbf{n}_1}^*(\mathbf{x}_{P'(1)a}) \cdots \psi_{\mathbf{n}_N}^*(\mathbf{x}_{P'(N)a}). \end{aligned} \quad (3.53)$$

Wir stellen die Koordinaten $\mathbf{x}_{P'(1)a}, \dots, \mathbf{x}_{P'(N)a}$ auf der rechten Seite in die Standardordnung $\mathbf{x}_{1a}, \dots, \mathbf{x}_{Na}$ um. Damit werden die Koordinaten $\mathbf{x}_{P(1)b}, \dots, \mathbf{x}_{P(N)b}$ zu $\mathbf{x}_{P(P'-1)b}, \dots, \mathbf{x}_{P(P'-1)b}$ umgestellt. Für die Hintereinanderausführung von P und P'^{-1} definieren wir $P'' = P P'^{-1}$ mit der Eigenschaft $p(P'') = p(P) + p(P')$. Damit reduziert sich (3.53) auf

$$\begin{aligned} (\mathbf{x}_{1b}, \dots, \mathbf{x}_{Nb}, \tau_b | \mathbf{x}_{1a}, \dots, \mathbf{x}_{Na}, \tau_a)^\epsilon &= \frac{1}{N!} \sum_{P''} \epsilon^{p(P'')} \sum_{\mathbf{n}_1} \cdots \sum_{\mathbf{n}_N} \psi_{\mathbf{n}_1}(\mathbf{x}_{P''(1)b}) \cdots \psi_{\mathbf{n}_N}(\mathbf{x}_{P''(N)b}) \\ &\times e^{-(E_{\mathbf{n}_1} + \dots + E_{\mathbf{n}_N})(\tau_b - \tau_a)/\hbar} \psi_{\mathbf{n}_1}^*(\mathbf{x}_{1a}) \cdots \psi_{\mathbf{n}_N}^*(\mathbf{x}_{Na}). \end{aligned} \quad (3.54)$$

Mit Hilfe der Spektraldarstellung der 1-Teilchen-Imaginärzeitentwicklungsamplitude in (3.48) folgt dann das Resultat:

$$(\mathbf{x}_{1b}, \dots, \mathbf{x}_{Nb}, \tau_b | \mathbf{x}_{1a}, \dots, \mathbf{x}_{Na}, \tau_a)^\epsilon = \frac{1}{N!} \sum_P \epsilon^{p(P)} (\mathbf{x}_{P(1)b}, \tau_b | \mathbf{x}_{1a}, \tau_a) \cdots (\mathbf{x}_{P(N)b}, \tau_b | \mathbf{x}_{Na}, \tau_a). \quad (3.55)$$

Es ist Ausgangspunkt für die Untersuchung lokaler und globaler thermodynamischer Eigenschaften für nichtwechselwirkende, identische Teilchen.

3.4 Kanonische Zustandssumme

Betrachten wir zunächst den Fall von $N = 2$ identischen Teilchen, bei denen sich die Imaginärzeitentwicklungsamplitude (3.55) reduziert auf

$$\begin{aligned} (\mathbf{x}_{1b}, \mathbf{x}_{2b}, \tau_b | \mathbf{x}_{1a}, \mathbf{x}_{2a}, \tau_a)^\epsilon &= \frac{1}{2!} \left\{ (\mathbf{x}_{1b}, \tau_b | \mathbf{x}_{1a}, \tau_a) (\mathbf{x}_{2b}, \tau_b | \mathbf{x}_{2a}, \tau_a) \right. \\ &\quad \left. + \epsilon (\mathbf{x}_{2b}, \tau_b | \mathbf{x}_{1a}, \tau_a) (\mathbf{x}_{1b}, \tau_b | \mathbf{x}_{2a}, \tau_a) \right\}. \end{aligned} \quad (3.56)$$

Wir erhalten die dazugehörige kanonische Zustandssumme, indem wir die Spur von (3.56) für $\tau_a = 0$ und $\tau_b = \hbar\beta$ bilden:

$$Z_2(\beta) = \int d^D x_1 \int d^D x_2 (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \hbar\beta | \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, 0)^\epsilon. \quad (3.57)$$

Unter Ausnutzung der Translationsinvarianz (3.45) und der Gruppeneigenschaft (3.49) der 1-Teilchen-Imaginärzeitentwicklungsamplitude geht (3.57) mit Hilfe von (3.56) über in

$$Z_2(\beta) = \frac{1}{2} \left\{ Z_1^2(\beta) + \epsilon Z_1(2\beta) \right\}. \quad (3.58)$$

Hierbei bezeichnet

$$Z_1(\beta) = \int d^D x (\mathbf{x}, \hbar\beta | \mathbf{x}, 0) \quad (3.59)$$

die 1-Teilchen-Zustandssumme, für die wir mit Hilfe von (3.48) die schon aus (2.17) bekannte Spektraldarstellung

$$Z_1(\beta) = \sum_{\mathbf{n}} e^{-\beta E_{\mathbf{n}}} \quad (3.60)$$

erhalten. Entsprechend lautet die Imaginärzeitentwicklungsamplitude (3.55) für $N = 3$ Teilchen:

$$\begin{aligned} (\mathbf{x}_{1b}, \mathbf{x}_{2b}, \mathbf{x}_{3b}, \tau_b | \mathbf{x}_{1a}, \mathbf{x}_{2a}, \mathbf{x}_{3a}, \tau_a)^\epsilon &= \frac{1}{3!} \left\{ (\mathbf{x}_{1b}, \tau_b | \mathbf{x}_{1a}, \tau_a) (\mathbf{x}_{2b}, \tau_b | \mathbf{x}_{2a}, \tau_a) (\mathbf{x}_{3b}, \tau_b | \mathbf{x}_{3a}, \tau_a) \right. \\ &\quad + (\mathbf{x}_{3b}, \tau_b | \mathbf{x}_{1a}, \tau_a) (\mathbf{x}_{1b}, \tau_b | \mathbf{x}_{2a}, \tau_a) (\mathbf{x}_{2b}, \tau_b | \mathbf{x}_{3a}, \tau_a) + (\mathbf{x}_{2b}, \tau_b | \mathbf{x}_{1a}, \tau_a) (\mathbf{x}_{3b}, \tau_b | \mathbf{x}_{2a}, \tau_a) (\mathbf{x}_{1b}, \tau_b | \mathbf{x}_{3a}, \tau_a) \\ &\quad + \epsilon (\mathbf{x}_{1b}, \tau_b | \mathbf{x}_{1a}, \tau_a) (\mathbf{x}_{3b}, \tau_b | \mathbf{x}_{2a}, \tau_a) (\mathbf{x}_{2b}, \tau_b | \mathbf{x}_{3a}, \tau_a) + \epsilon (\mathbf{x}_{2b}, \tau_b | \mathbf{x}_{1a}, \tau_a) (\mathbf{x}_{1b}, \tau_b | \mathbf{x}_{2a}, \tau_a) (\mathbf{x}_{3b}, \tau_b | \mathbf{x}_{3a}, \tau_a) \\ &\quad \left. + \epsilon (\mathbf{x}_{3b}, \tau_b | \mathbf{x}_{1a}, \tau_a) (\mathbf{x}_{2b}, \tau_b | \mathbf{x}_{2a}, \tau_a) (\mathbf{x}_{1b}, \tau_b | \mathbf{x}_{3a}, \tau_a) \right\} \end{aligned} \quad (3.61)$$

und die kanonische Zustandssumme

$$Z_3(\beta) = \int d^D x_1 \int d^D x_2 \int d^D x_3 (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \hbar\beta | \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, 0)^\epsilon \quad (3.62)$$

ergibt sich zu

$$Z_3(\beta) = \frac{1}{6} \left\{ Z_1^3(\beta) + 3\epsilon Z_1(\beta) Z_1(2\beta) + 2Z_1(3\beta) \right\}. \quad (3.63)$$

Nun wollen wir unsere Diskussion auf die kanonische Zustandssumme für N identische Teilchen ausdehnen:

$$Z_N(\beta) = \int d^D x_1 \cdots \int d^D x_N (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N, \hbar\beta | \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N, 0)^\epsilon, \quad (3.64)$$

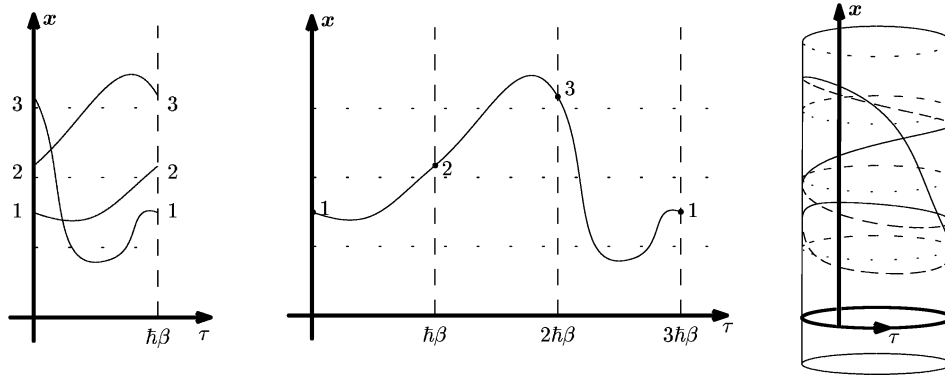


Abbildung 3.1: Verlauf von drei Teilchenpfaden a) in der normalen Darstellung innerhalb einer Periode, b) in periodisch fortgesetzter Darstellung und c) aufgewickelt auf einem Zylinder mit Umfang $\hbar\beta$.

die durch (3.55) übergeht in

$$Z_N(\beta) = \frac{1}{N!} \sum_P \epsilon^{p(P)} \int d^D x_1 \cdots \int d^D x_N (\mathbf{x}_{P(1)}, \hbar\beta | \mathbf{x}_1, 0) \cdots (\mathbf{x}_{P(N)}, \hbar\beta | \mathbf{x}_N, 0). \quad (3.65)$$

Wie wir am Beispiel von $N = 2$ und $N = 3$ identischen Teilchen gesehen haben, ist die Auswertung von (3.65) keineswegs einfach. Das liegt daran, daß bei der Berechnung der kanonischen Zustandssumme über alle periodischen Pfade das Prinzip der Ununterscheidbarkeit identischer Teilchen zu berücksichtigen ist. Die dabei auftretende Problematik ist in Abbildung 3.1 verdeutlicht. Dort ist in a) ein Beitrag zu (3.65) für $N = 3$ in Form von Teilchenpfaden dargestellt. Teilchen 1 kommt zur Zeit $\tau = \hbar\beta$ nicht an seinen Startpunkt sondern am Startpunkt von Teilchen 2 an. Auch Teilchen 2 kommt zur Zeit $\tau = \hbar\beta$ nicht an seinem Startpunkt sondern am Startpunkt von Teilchen 3 an, das wiederum nach der Zeit $\tau = \hbar\beta$ am Startpunkt des ersten Teilchens ankommt. Insgesamt führt dies auf einen Teilchenzyklus der Länge 3, den man sich nach Abbildung 3.1 auch in der periodisch fortgesetzten Darstellung oder aufgewickelt auf einem Zylinder mit Umfang $\hbar\beta$ verdeutlichen kann. Aufgrund der Ununterscheidbarkeit identischer Teilchen treten solche Mehrfachzyklen mit den einfachen Zyklen gleichberechtigt auf und werden in der kanonischen Zustandssumme (3.65) automatisch berücksichtigt.

Nun wollen wir zunächst einen dieser Mehrfachzyklen der Länge n genauer betrachten, der auf das Integral

$$h_n(\beta) = \int d^D x_1 \cdots \int d^D x_n (\mathbf{x}_1, \hbar\beta | \mathbf{x}_n, 0) (\mathbf{x}_n, \hbar\beta | \mathbf{x}_{n-1}, 0) \cdots (\mathbf{x}_3, \hbar\beta | \mathbf{x}_2, 0) (\mathbf{x}_2, \hbar\beta | \mathbf{x}_1, 0) \quad (3.66)$$

führt. Aufgrund der Translationsinvarianz der 1-Teilchen-Imaginärzeitentwicklungsamplitude (3.45) erhalten wir

$$h_n(\beta) = \int d^D x_1 \cdots \int d^D x_n (\mathbf{x}_1, n\hbar\beta | \mathbf{x}_n, (n-1)\hbar\beta) \times (\mathbf{x}_n, (n-1)\hbar\beta | \mathbf{x}_{n-1}, (n-2)\hbar\beta) \cdots (\mathbf{x}_3, 2\hbar\beta | \mathbf{x}_2, \hbar\beta) (\mathbf{x}_2, \hbar\beta | \mathbf{x}_1, 0). \quad (3.67)$$

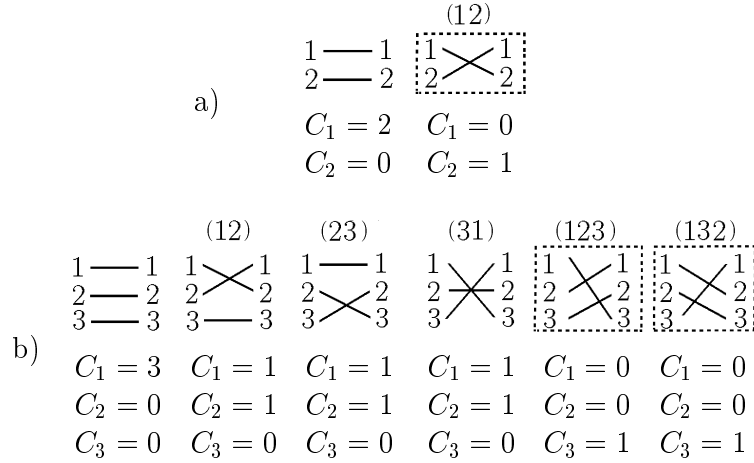


Abbildung 3.2: Permutationen für a) $N = 2$ bzw. b) $N = 3$ Teilchen und die dabei auftretende Zahl C_n von Zyklen der Länge n .

Mit Hilfe der Gruppeneigenschaft (3.49) und der 1-Teilchen-Zustandssumme (3.59) reduziert sich dann (3.67) auf

$$h_n(\beta) = \int d^D x_1 (\mathbf{x}_1, n\hbar\beta | \mathbf{x}_1, 0) = Z_1(n\beta). \tag{3.68}$$

Die kanonische Zustandssumme (3.65) kann nun durch die Integrale (3.66), (3.68) geschrieben werden als

$$Z_N(\beta) = \frac{1}{N!} \sum_P \epsilon^{p(P)} \prod_{n=1}^{\sum nC_n=N} [Z_1(n\beta)]^{C_n}. \tag{3.69}$$

Hierbei soll C_n die Anzahl der Zyklen der Länge n bedeuten, die bei einer bestimmten Permutation P auftreten. Statt nun C_n als Funktion P aufzufassen, können wir aber auch umgekehrt die Permutation P als eine Kombination verschiedener C_n darstellen. Die Summation über alle Permutationen in (3.69) geht dann in eine Summation über alle verschiedene Tupel (C_1, \dots, C_N) über, die der Nebenbedingung $\sum nC_n = N$ genügen. Da aber in der Permutationsgruppe ein festes Tupel (C_1, \dots, C_N) mehrfach auftreten kann, müssen wir noch einen Multiplizitätsfaktor $M(C_1, \dots, C_N)$ berücksichtigen und erhalten:

$$Z_N(\beta) = \frac{1}{N!} \sum_{C_1, \dots, C_N}^{\sum nC_n=N} \epsilon^{p(P)} M(C_1, \dots, C_N) \prod_{n=1}^{\infty} [Z_1(n\beta)]^{C_n}. \tag{3.70}$$

Hierbei haben wir formal das Produkt auf alle natürlichen Zahlen ausgedehnt, da für alle $n > N$ aufgrund der Nebenbedingung $\sum nC_n = N$ die Identität $C_n = 0$ gilt und somit die hinzugefügten Faktoren identisch eins sind.

Wir berechnen zunächst die Multiplizitätsfaktoren exemplarisch für $N = 2$ und $N = 3$. Hierzu untersuchen wir die Zahl C_n der auftretenden n -Zyklen für die entsprechenden Permutationsgruppen.

Die Multiplizitätsfaktoren lauten für $N = 2$ gemäß Abb. 3.2 a)

$$M(C_1 = 2, C_2 = 0) = 1, \quad M(C_1 = 0, C_2 = 1) = 1, \quad (3.71)$$

und für $N = 3$ gemäß Abb. 3.2 b)

$$\begin{aligned} M(C_1 = 3, C_2 = 0, C_3 = 0) &= 1, \\ M(C_1 = 1, C_2 = 1, C_3 = 0) &= 3, \\ M(C_1 = 0, C_2 = 0, C_3 = 1) &= 2. \end{aligned} \quad (3.72)$$

Nun berechnen wir die Multiplizitätsfaktoren $M(C_1, \dots, C_N)$ im allgemeinen Fall. Hierzu bemerken wir, daß es bei einem festen N -Tupel (C_1, \dots, C_N) insgesamt $N!$ mögliche Kombinationsmöglichkeiten gibt. Von diesen tragen aber nicht alle bei, wie wir uns an folgenden Beispielen veranschaulichen können:

- Beim Dreiertupel $(C_1 = 0, C_2 = 0, C_3 = 1)$ gibt es insgesamt 6 Kombinationen (123), (312), (231), (132), (213), (321). Nicht alle diese Möglichkeiten stellen aber verschiedene Permutationen dar. So sind die Kombinationen (123), (312), (231) bzw. die Kombinationen (132), (213), (321) verschiedene Darstellungen der Permutation P_1 bzw. P_2 mit

$$P_1 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix}, \quad P_2 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.73)$$

- Auch beim Dreiertupel $(C_1 = 3, C_2 = 0, C_3 = 0)$ gibt es insgesamt 6 Kombinationen (1)(2)(3), (1)(3)(2), (2)(1)(3), (2)(3)(1), (3)(1)(2), (3)(2)(1). Diese sind aber alle Darstellungen der Permutation

$$P_3 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} \quad (3.74)$$

und brauchen daher nicht mehrfach berücksichtigt zu werden.

Allgemein läßt sich demnach festhalten:

- Durch zyklische Vertauschung innerhalb eines n -Zyklus entstehen keine neuen Permutationen. Das sind bei einer Anzahl C_n von n -Zyklen insgesamt n^{C_n} irrelevante Kombinationen.
- Durch Vertauschung der Zyklen derselben Länge entstehen keine neuen Permutationen. Bei einer Anzahl C_n von n -Zyklen sind das $C_n!$ irrelevante Kombinationen.

Aufgrund dieser kombinatorischen Überlegungen ergibt sich der Multiplizitätsfaktor allgemein zu:

$$M(C_1, \dots, C_N) = \frac{N!}{\prod_n C_n! n^{C_n}}. \quad (3.75)$$

Dabei ist zu beachten, daß (3.75) nur für solche C_n auszuwerten ist, die die Nebenbedingung $\sum nC_n = N$ erfüllen. Wir beobachten, daß die Multiplizitätsfaktoren (3.71), (3.72) die Summenregeln

$$M(C_1 = 2, C_2 = 0) + M(C_1 = 0, C_2 = 1) = 2!, \quad (3.76)$$

$$M(C_1 = 3, C_2 = 0, C_3 = 0) + M(C_1 = 1, C_2 = 1, C_3 = 0) + M(C_1 = 0, C_2 = 0, C_3 = 1) = 3! \quad (3.77)$$

erfüllen. Deshalb untersuchen wir im allgemeinen Fall die Reihe

$$S_N = \sum_{C_1, \dots, C_N}^{\sum nC_n = N} M(C_1, \dots, C_N) \quad (3.78)$$

und vermuten, daß sie sich zu $N!$ ergibt. Zunächst setzen wir (3.75) in (3.78) ein:

$$S_N = \sum_{C_1, \dots, C_N}^{\sum nC_n = N} \frac{N!}{\prod_n C_n! n^{C_n}}. \quad (3.79)$$

Dann berücksichtigen wir die Nebenbedingung bei der Summation in (3.79) durch ein Kronecker-Symbol

$$\sum_{C_1, \dots, C_N}^{\sum nC_n = N} = \sum_{C_1=0}^{\infty} \sum_{C_2=0}^{\infty} \cdots \delta_{\sum nC_n, N}, \quad (3.80)$$

wobei wir für das Kronecker-Symbol die Integraldarstellung

$$\delta_{\sum nC_n, N} = \int_0^1 dx \exp \left\{ -2\pi i \left(\sum nC_n - N \right) x \right\} \quad (3.81)$$

verwenden. Damit geht (3.79) über in

$$S_N = N! \int_0^1 dx e^{2\pi i N x} \prod_{n=1}^{\infty} \left(\sum_{C_n=0}^{\infty} \frac{e^{-2\pi i n C_n x}}{C_n! n^{C_n}} \right). \quad (3.82)$$

Die Auswertung der C_n -Reihe führt auf eine Exponentialfunktion

$$S_N = N! \int_0^1 dx e^{2\pi i N x} \exp \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-2\pi i n x}}{n} \right\} \quad (3.83)$$

und die verbleibende n -Reihe ist die Taylor-Reihe

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n} = -\ln(1-z). \quad (3.84)$$

Damit erhalten wir schließlich die vermutete Summeregeln:

$$S_N = N! \int_0^1 dx \frac{e^{2\pi i N x}}{1 - e^{-2\pi i x}} = N! \sum_{k=0}^{\infty} \int_0^1 dx e^{2\pi i (N-k)x} = N!. \quad (3.85)$$

Sie besagt, daß die verschiedenen C_n mit der Nebenbedingung $\sum nC_n = N$ tatsächlich alle $N!$ möglichen Permutationen erfassen.

Nach diesen kombinatorischen Überlegungen kehren wir wieder zur kanonischen Zustandssumme (3.70) zurück, wo wir die Multiplizitätsfaktoren (3.75) einsetzen. Allerdings tritt dann noch die Parität $p(P)$ als Funktion der Permutation P auf. Um auch die Parität in Abhängigkeit der Zyklenzahlen C_n angeben zu können, betrachten wir beispielsweise die Permutation

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 5 & 3 & 2 & 4 & 6 & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.86)$$

die wir auch in der Form (156)(23)(4) notieren können. Der Zyklus (4) ist von der Länge 1 und hat eine gerade Parität, der Zyklus (23) hat die Länge 2 und eine ungerade Parität. Der Zyklus (156) ist wiederum von ungerader Länge und gerader Parität. Wir verallgemeinern dies auf einen einzelnen geschlossenen n -Zyklus und erhalten $p(n) = n+1$. Die gesamte Parität einer Permutation setzt sich dann aus den Paritäten der einzelnen Zyklen additiv zusammen:

$$p(P) = p(P(C_1, \dots, C_N)) = \sum_{n=1}^{\infty} (n+1) C_n. \quad (3.87)$$

Speziell im Falle der Permutation (3.86) ist $p(C_1 = 1, C_2 = 1, C_3 = 1, C_4 = 0, C_5 = 0, C_6 = 0) = 9$, so daß insgesamt eine ungerade Parität vorliegt.

Mit Hilfe von (3.75) und (3.87) erhalten wir für die kanonische Zustandssumme (3.70) die Zyklendarstellung

$$Z_N(\beta) = \sum_{C_1, \dots, C_N}^{\sum nC_n = N} \prod_{n=1}^{\infty} \frac{1}{C_n!} \left[\epsilon^{n+1} \frac{Z_1(n, \beta)}{n} \right]^{C_n}. \quad (3.88)$$

Wir bemerken, daß (3.88) durch Spezialisierung auf $N = 2$ bzw. $N = 3$ mit den auftretenden Zyklenzahlen C_n in (3.71) bzw. (3.72) tatsächlich in das frühere Resultat (3.58) bzw. (3.63) übergeht.

3.5 Rekursionsrelation

Die Zyklendarstellung (3.88) der kanonischen Zustandssumme $Z_N(\beta)$ ist für größere Teilchenzahlen N nicht effizient, da nur diejenigen Zyklenzahlen C_n beitragen, die der Nebenbedingung $\sum nC_n = N$ genügen. Wir können uns aber von der Nebenbedingung $\sum nC_n = N$ befreien, indem wir die erzeugende Funktion

$$\mathcal{Z}(\beta, z) = \sum_{N=0}^{\infty} Z_N(\beta) z^N \quad (3.89)$$

eingeführen. Ist die erzeugende Funktion $\mathcal{Z}(\beta, z)$ bekannt, so läßt sich die kanonische Zustandssumme $Z_N(\beta)$ berechnen durch

$$Z_N(\beta) = \frac{1}{N!} \left. \frac{\partial^N \mathcal{Z}(\beta, z)}{\partial z^N} \right|_{z=0}. \quad (3.90)$$

Wir setzen nun die Zyklendarstellung (3.88) in (3.89) ein und beachten, daß für die Teilchenzahl N die Nebenbedingung $N = \sum nC_n$ gilt:

$$\mathcal{Z}(\beta, z) = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{C_1, \dots, C_N}^{\sum nC_n=N} \prod_{n=1}^{\infty} \frac{1}{C_n!} \left[\epsilon^{n+1} \frac{Z_1(n\beta)z^n}{n} \right]^{C_n}. \quad (3.91)$$

Berücksichtigen wir die Nebenbedingung $\sum nC_n = N$ bei der Summe über die Zyklenzahlen C_n durch ein Kronecker-Symbol gemäß (3.80), so läßt sich die N -Summe unmittelbar ausführen:

$$\mathcal{Z}(\beta, z) = \prod_{n=1}^{\infty} \sum_{C_n=0}^{\infty} \frac{1}{C_n!} \left[\epsilon^{n+1} \frac{Z_1(n\beta)z^n}{n} \right]^{C_n}. \quad (3.92)$$

Die Auswertung der C_n -Reihe führt auf eine Exponentialfunktion

$$\mathcal{Z}(\beta, z) = \exp \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \epsilon^{n+1} \frac{Z_1(n\beta)z^n}{n} \right\}. \quad (3.93)$$

Wir bemerken, daß sich die Zustandssumme des Vakuums, bei dem keine Teilchen vorliegen, aus (3.90) für $N = 0$ und (3.93) ergibt:

$$Z_0(\beta) = 1. \quad (3.94)$$

Nun zeigen wir, daß sich für die kanonische Zustandssumme $Z_N(\beta)$ mit $N \geq 1$ eine nützliche Rekursionsrelation ableiten läßt. Hierzu beginnen wir mit der Feststellung, daß die erzeugende Funktion (3.93) der folgenden Differentialgleichung genügt:

$$\frac{\partial \mathcal{Z}(\beta, z)}{\partial z} = \mathcal{Z}(\beta, z) \sum_{k=1}^{\infty} \epsilon^{k+1} Z_1(k\beta) z^{k-1}. \quad (3.95)$$

Hieraus läßt sich die N te Ableitung der erzeugenden Funktion mit Hilfe der Leibniz-Regel der Differentiation berechnen:

$$\frac{\partial^N \mathcal{Z}(\beta, z)}{\partial z^N} = \sum_{n=1}^N \frac{(N-1)!}{(n-1)!(N-n)!} \frac{\partial^{N-n} \mathcal{Z}(\beta, z)}{\partial z^{N-n}} \sum_{k=1}^{\infty} \epsilon^{k+1} Z_1(k\beta) \frac{\partial^{n-1} z^{k-1}}{\partial z^{n-1}}. \quad (3.96)$$

Unter Berücksichtigung der Identität

$$\frac{\partial^{n-1} z^{k-1}}{\partial z^{n-1}} = (k-1)(k-2) \cdots (k-n+1) z^{k-n} = \begin{cases} \frac{(k-1)!}{(k-n)!} z^{k-n}, & k \geq n \\ 0, & 1 \leq k < n \end{cases} \quad (3.97)$$

erhalten wir aus (3.96)

$$\frac{\partial^N \mathcal{Z}(\beta, z)}{\partial z^N} = (N-1)! \sum_{n=1}^N \frac{1}{(N-n)!} \frac{\partial^{N-n} \mathcal{Z}(\beta, z)}{\partial z^{N-n}} \frac{1}{(n-1)!} \sum_{k=n}^{\infty} \epsilon^{k+1} Z_1(k\beta) \frac{(k-1)!}{(k-n)!} z^{k-n}. \quad (3.98)$$

Die Auswertung von (3.98) an der Stelle $z = 0$ führt auf

$$\left. \frac{\partial^N \mathcal{Z}(\beta, z)}{\partial z^N} \right|_{z=0} = (N-1)! \sum_{n=1}^N \frac{\epsilon^{n+1}}{(N-n)!} \left. \frac{\partial^{N-n} \mathcal{Z}(\beta, z)}{\partial z^{N-n}} \right|_{z=0} Z_1(n, \beta). \quad (3.99)$$

Verwenden wir noch (3.90), so folgt hieraus die gesuchte Rekursionsrelation für die kanonische Zustandssumme:

$$Z_N(\beta) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \epsilon^{n+1} Z_1(n, \beta) Z_{N-n}(\beta). \quad (3.100)$$

Der Rekursionsanfang ist dabei durch (3.94) gegeben. Wir bemerken, daß die Rekursion (3.94), (3.100) durch Spezialisierung auf $N = 2$ bzw. $N = 3$ unmittelbar auf das frühere Resultat (3.58) bzw. (3.63) führt.

3.6 Freie Teilchen im Kasten

Die bisher diskutierten Resultate für die kanonische Zustandssumme $Z_N(\beta)$ von N nichtwechselwirkenden identischen Teilchen sind unabhängig vom äußeren Potential $V(\mathbf{x})$ gültig. Im folgenden betrachten wir die wichtige Anwendung, daß sich die N Teilchen in einem Kasten mit den Seitenlängen L befinden, in dem das äußere Potential verschwindet: $V(\mathbf{x}) = 0$. Wie in der Festkörperphysik üblich, fordern wir für die 1-Teilchen-Wellenfunktionen $\psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x})$ periodische Randbedingungen:

$$\psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x} + L \mathbf{e}_i) = \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}); \quad i = 1, \dots, D. \quad (3.101)$$

Die Lösungen der 1-Teilchen-Schrödinger-Gleichung (2.53), (2.62), die diesen periodischen Randbedingungen genügen, sind die ebenen Wellen

$$\psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{L^D}} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} / \hbar} \quad (3.102)$$

mit den Energieeigenwerten

$$E_{\mathbf{n}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2M}. \quad (3.103)$$

Hierbei sind die Impulse \mathbf{p} gemäß

$$\mathbf{p} = \hbar \frac{2\pi}{L} \mathbf{n} \quad (3.104)$$

durch die Quantenzahlen $\mathbf{n} = (n_1, \dots, n_D)$ mit $n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ festgelegt. Die 1-Teilchen-Zustandssumme (3.60) lautet demnach

$$Z_1(\beta) = \sum_{n_1=-\infty}^{\infty} \cdots \sum_{n_D=-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{2\pi^2 \hbar^2 \beta}{ML^2} (n_1^2 + \dots + n_D^2) \right\}. \quad (3.105)$$

Wir sind nun am thermodynamischen Limes $L \rightarrow \infty$ eines unendlich großen Kastens interessiert, der gemäß (3.105) dem semiklassischen Limes $\hbar \rightarrow 0$ entspricht. Wir können in diesem Grenzfall die Euler-MacLaurin-Formel (2.218) anwenden und damit die Summen in (3.105) durch Integrale ersetzen. Unter Beachtung von (3.104) folgt dann

$$Z_1(\beta) = V \int \frac{d^D p}{(2\pi\hbar)^D} e^{-\beta \mathbf{p}^2/2M}, \quad (3.106)$$

wobei $V = L^D$ das Volumen des Kastens darstellt. Das Gauß-Integral (3.106) läßt sich unmittelbar auswerten:

$$Z_1(\beta) = \frac{V}{\lambda^D}. \quad (3.107)$$

Hierbei bezeichnet λ die thermische de Broglie-Wellenlänge (2.11). Der Vergleich von (2.10) mit (3.107) zeigt, daß es sich bei $Z_1(\beta)$ gerade um die Zustandssumme handelt, die ein klassisches Teilchen in einem Kasten mit Volumen V besitzt.

Wir wollen nun die Zustandssumme für N identische Teilchen berechnen, die sich in diesem Kasten befinden. Mit Hilfe von (2.11), (3.107) reduziert sich die Rekursionsrelation (3.100) auf

$$Z_N(\beta) = \frac{V}{\lambda^D N} \sum_{n=1}^N \frac{\epsilon^{n+1}}{n^{D/2}} Z_{N-n}(\beta). \quad (3.108)$$

Um (3.108) effizient iterieren zu können, führen wir die dimensionslose Temperatur

$$\tau = \left(\frac{V}{\lambda^D} \right)^{2/D} = V^{2/D} \frac{M k_B}{2\pi\hbar^2} T \quad (3.109)$$

ein. In dieser dimensionslosen Variablen ausgedrückt lautet die Rekursionsrelation (3.108):

$$Z_N(\tau) = \frac{\tau^{D/2}}{N} \sum_{n=1}^N \frac{\epsilon^{n+1}}{n^{D/2}} Z_{N-n}(\tau). \quad (3.110)$$

Der Rekursionsanfang (3.94) wird von diesem Variablenwechsel natürlich nicht beeinflusst:

$$Z_0(\tau) = 1. \quad (3.111)$$

In $D = 3$ Raumdimensionen erhalten wir damit beispielsweise die folgenden Zustandssummen bis zu 3 Teilchen:

$$Z_1(\tau) = \tau^{3/2}, \quad (3.112)$$

$$Z_2(\tau) = \frac{\tau^{3/2}}{2^{5/2}} + \epsilon \frac{\tau^3}{2} \quad (3.113)$$

$$Z_3(\tau) = \frac{\tau^{3/2}}{3^{5/2}} + \epsilon \frac{\tau^3}{2^{5/2}} + \frac{\tau^{9/2}}{6}. \quad (3.114)$$

Hat man die Zustandssumme $Z_N(\tau)$ für eine große Teilchenzahl N bestimmt, dann ist es für die graphische Darstellung des Resultates sinnvoll, einen weiteren Variablenwechsel zur reduzierten Temperatur

$$t = \frac{T}{T_c^{(0)}} \quad (3.115)$$

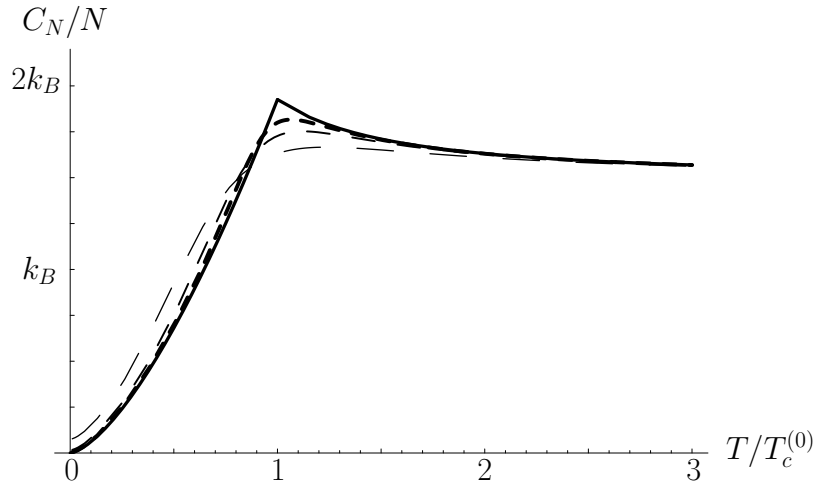


Abbildung 3.3: Wärmekapazität pro Teilchen für kanonisches Ensemble mit $N = 20, 100, 500$ Teilchen und für das großkanonische Ensemble (von unten nach oben für $T \gg T_c^{(0)}$).

vorzunehmen. Hierbei ist $T_c^{(0)}$ definiert durch

$$T_c^{(0)} = \frac{2\pi\hbar^2}{k_B M} \left[\frac{N}{V\zeta(3/2)} \right]^{2/3}, \quad (3.116)$$

und

$$\zeta(\nu) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^\nu} \quad (3.117)$$

bezeichnet die Riemannsche Zeta-Funktion. Demnach lassen sich die beiden reduzierten Temperaturen τ und t gemäß

$$\tau = \left[\frac{N}{\zeta(3/2)} \right]^{2/3} t \quad (3.118)$$

zueinander in Beziehung setzen. Wir betrachten nun die Wärmekapazität von nichtwechselwirkenden Bosonen ($\epsilon = +1$) im kanonischen Ensemble in $D = 3$ Raumdimensionen. Sie berechnet sich aus der kanonischen Zustandssumme über

$$C_N = k_B T \frac{\partial^2}{\partial T^2} \left\{ T \ln Z_N(\beta) \right\} = k_B t \frac{\partial^2}{\partial t^2} \left\{ t \ln Z_N(t) \right\} \quad (3.119)$$

und ist in Abbildung 3.3 graphisch dargestellt. Wir stellen fest, daß die Wärmekapazität C_N im Hochtemperaturlimes gegen das Dulong-Petit-Gesetz strebt. Es besagt, daß jeder der $D = 3$ Freiheitsgrade den Beitrag $0.5k_B$ pro Teilchen zur Wärmekapazität beisteuert:

$$\lim_{T \rightarrow \infty} C_N = \frac{3}{2} k_B N. \quad (3.120)$$

Außerdem bemerken wir, daß die Wärmekapazität C_N für das kanonische Ensemble im thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$ gegen das Ergebnis der großkanonischen Rechnung strebt, die wir im folgenden Kapitel ausführlich diskutieren werden. Wir sehen aber schon an dieser Stelle,

daß ein unendlich großes System zu einem Phasenübergang führen kann, da bei der kritischen Temperatur (3.116) die großkanonisch berechnete Wärmekapazität einen Sprung in ihrer ersten Ableitung besitzt. Nach der Ehrenfestschen Klassifikation von Phasenübergängen [10] handelt es sich demnach beim freien Bose-Gas um einen Phasenübergang dritter Ordnung. Demgegenüber zeigt die kanonische Wärmekapazität C_N im gesamten Temperaturbereich keine Spitzen oder Singularitäten. Dies weist darauf hin, daß bei endlichen Systemen keine Phasenübergänge auftreten können. Phasenübergänge entstehen demnach erst im thermodynamischen Limes eines unendlich großen Systems.

Kapitel 4

Ideale Quantengase im großkanonischen Ensemble

Im großkanonischen Ensemble wird ein offenes System beschrieben, das Wärme und Teilchen mit der Umgebung austauschen kann. In Abschnitt 1.3 haben wir die statistischen Eigenschaften eines großkanonischen Ensembles abgeleitet. Die großkanonische Zustandssumme ist nach (1.25) und (1.31) gegeben durch

$$\mathcal{Z} = \sum_{\nu} e^{-(E_{\nu} - \mu N_{\nu})/k_B T}, \quad (4.1)$$

während die Wahrscheinlichkeitsverteilung (1.26) einer Boltzmann-Verteilung entspricht:

$$p_{\nu} = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-(E_{\nu} - \mu N_{\nu})/k_B T}. \quad (4.2)$$

Bei einer Observablen O , die im Mikrozustand ν den Wert O_{ν} annimmt, lautet der Ensemblemittelwert

$$\langle O \rangle = \frac{\sum_{\nu} O_{\nu} e^{-(E_{\nu} - \mu N_{\nu})/k_B T}}{\sum_{\nu} e^{-(E_{\nu} - \mu N_{\nu})/k_B T}}. \quad (4.3)$$

Der Vergleich von (2.1), (2.2), (2.4) mit (4.1)–(4.3) zeigt, worin der Unterschied zwischen einem kanonischen und einem großkanonischen Ensemble besteht. Da beim großkanonischen Ensemble zusätzlich ein Teilchenaustausch zwischen System und Umgebung möglich ist, wird in der Boltzmann-Verteilung die Energie E_{ν} des Mikrozustandes ν um den Beitrag μN_{ν} für den Teilchenaustausch vermindert. Demnach bestimmt nur die Energie $E_{\nu} - \mu N_{\nu}$ die thermische Besetzung des Mikrozustandes ν im Rahmen der Boltzmann-Verteilung. Hierbei beschreibt das chemische Potential μ gemäß (1.16) diejenige Energie, um die die innere Energie U zunimmt ($\mu > 0$) oder abnimmt ($\mu < 0$), wenn ein Teilchen vom System aufgenommen wird.

4.1 Großkanonische Zustandssumme

Wir behandeln nun nichtwechselwirkende identische Teilchen im großkanonischen Ensemble. Ein einzelner Mikrozustand ν ist dann dadurch charakterisiert, daß die jeweiligen 1-Teilchen-Zustände \mathbf{n} mit $n_{\mathbf{n}}$ Teilchen besetzt sind:

$$\nu = (n_{\mathbf{n}}). \quad (4.4)$$

Da die Teilchen nicht miteinander wechselwirken, setzt sich die Energie E_{ν} des Mikrozustandes ν aus den 1-Teilchen-Energien additiv zusammen:

$$E_{\nu} = \sum_{\mathbf{n}} n_{\mathbf{n}} E_{\mathbf{n}}. \quad (4.5)$$

Die Teilchenzahl N_{ν} des Mikrozustandes ν ist die Summe über alle Teilchenzahlen $n_{\mathbf{n}}$ in den 1-Teilchen-Zuständen \mathbf{n} :

$$N_{\nu} = \sum_{\mathbf{n}} n_{\mathbf{n}}. \quad (4.6)$$

Die großkanonische Zustandssumme (4.1) ergibt sich in dieser Besetzungsdarstellung zu

$$\mathcal{Z} = \prod_{\mathbf{n}} \left[\sum_{n_{\mathbf{n}}} e^{-(E_{\mathbf{n}} - \mu) n_{\mathbf{n}} / k_B T} \right]. \quad (4.7)$$

Der Unterschied zwischen Bosonen und Fermionen manifestiert sich darin, welche Besetzungszahlen $n_{\mathbf{n}}$ in (4.7) zugelassen werden. Bei Bosonen können die 1-Teilchen-Zustände \mathbf{n} durch beliebig viele Teilchen besetzt werden:

$$\text{Bosonen:} \quad n_{\mathbf{n}} = 0, 1, 2, \dots \quad (4.8)$$

Demgegenüber kann bei Fermionen nach dem Pauli-Prinzip ein 1-Teilchen-Zustand \mathbf{n} höchstens durch ein Teilchen besetzt werden:

$$\text{Fermionen:} \quad n_{\mathbf{n}} = 0, 1. \quad (4.9)$$

Im Falle von Bosonen führen die Besetzungszahlen (4.8) in (4.7) auf eine geometrische Reihe, die sich unmittelbar auswerten läßt:

$$\mathcal{Z} = \prod_{\mathbf{n}} \left[1 - e^{-(E_{\mathbf{n}} - \mu) / k_B T} \right]^{-1}. \quad (4.10)$$

Im Falle von Fermionen sind dagegen die Besetzungszahlen in (4.7) durch (4.9) beschränkt und wir erhalten

$$\mathcal{Z} = \prod_{\mathbf{n}} \left[1 + e^{-(E_{\mathbf{n}} - \mu) / k_B T} \right]. \quad (4.11)$$

Beide Fälle (4.10) und (4.11) lassen sich mit Hilfe des Parameters $\epsilon = \pm 1$ zusammenfassen:

$$\mathcal{Z} = \prod_{\mathbf{n}} \left[1 - \epsilon e^{-(E_{\mathbf{n}} - \mu) / k_B T} \right]^{-\epsilon}. \quad (4.12)$$

Damit ergibt sich die großkanonische freie Energie (1.32) zu

$$\mathcal{F} = \frac{\epsilon}{\beta} \sum_{\mathbf{n}} \ln \left[1 - \epsilon e^{-\beta(E_{\mathbf{n}} - \mu)} \right]. \quad (4.13)$$

Als wichtiges physikalisches Beispiel für einen großkanonischen Ensemblemittelwert (4.3) berechnen wir Mittelung der mittleren Teilchenzahl $n_{\mathbf{n}}$ im 1-Teilchen-Zustand \mathbf{n} . Mit den Identifikationen (4.4)–(4.6) folgt zunächst im allgemeinen Fall

$$\langle O \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \prod_{\mathbf{n}'} \left\{ \sum_{n_{\mathbf{n}'}} e^{-\beta(E_{\mathbf{n}'} - \mu)n_{\mathbf{n}'}} \right\} O_{\{n_{\mathbf{n}'}\}}, \quad (4.14)$$

wobei $O_{\{n_{\mathbf{n}'}\}}$ den Wert der Observablen O bei vorgegebenen Besetzungszahlen $n_{\mathbf{n}'}$ angibt. Damit erhalten wir für die mittlere Teilchenzahl

$$\langle n_{\mathbf{n}} \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \prod_{\mathbf{n}'} \left\{ \sum_{n_{\mathbf{n}'}} e^{-\beta(E_{\mathbf{n}'} - \mu)n_{\mathbf{n}'}} \right\} n_{\mathbf{n}}. \quad (4.15)$$

Eine Faktorisierung des Produktes führt auf

$$\langle n_{\mathbf{n}} \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \prod_{\mathbf{n}' \neq \mathbf{n}} \left\{ \sum_{n_{\mathbf{n}'}} e^{-\beta(E_{\mathbf{n}'} - \mu)n_{\mathbf{n}'}} \right\} \sum_{n_{\mathbf{n}}} n_{\mathbf{n}} e^{-\beta(E_{\mathbf{n}} - \mu)n_{\mathbf{n}}}. \quad (4.16)$$

Die $n_{\mathbf{n}}$ -Summe läßt sich mit Hilfe einer partielle Ableitung nach der 1-Teilchen-Energie auswerten:

$$\sum_{n_{\mathbf{n}}} n_{\mathbf{n}} e^{-\beta(E_{\mathbf{n}} - \mu)n_{\mathbf{n}}} = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial E_{\mathbf{n}}} \sum_{n_{\mathbf{n}}} e^{-\beta(E_{\mathbf{n}} - \mu)n_{\mathbf{n}}}, \quad (4.17)$$

so daß sich (4.16) mit Hilfe von (4.7) reduziert auf

$$\langle n_{\mathbf{n}} \rangle = -\frac{1}{\beta \mathcal{Z}} \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial E_{\mathbf{n}}}. \quad (4.18)$$

Verwendet man nun aufgrund von (1.32) die in (4.13) berechnete großkanonische freie Energie, so ergibt sich die mittlere Teilchenzahl zu

$$\langle n_{\mathbf{n}} \rangle = \frac{1}{e^{\beta(E_{\mathbf{n}} - \mu)} - \epsilon}. \quad (4.19)$$

Im Falle von Bosonen handelt es sich hierbei um die Bose-Einstein- und im Falle von Fermionen um die Fermi-Dirac-Verteilung. Die physikalische Bedeutung dieser mittleren Teilchenzahl $\langle n_{\mathbf{n}} \rangle$ wird offensichtlich, wenn wir aus der großkanonischen freien Energie (4.13) gemäß (1.37) die Teilchenzahl berechnen:

$$N = \sum_{\mathbf{n}} \frac{1}{e^{\beta(E_{\mathbf{n}} - \mu)} - \epsilon}. \quad (4.20)$$

Demnach besagen (4.19) und (4.20), daß sich die Teilchenzahl N durch Aufsummation der mittleren Teilchenzahlen $\langle n_{\mathbf{n}} \rangle$ über alle Quantenzahlen n ergibt.

Wir können nun an Beispiele der Zustandssumme untersuchen, wie sich die statistischen Größen im großkanonischen und im kanonischen Ensemble ineinander umrechnen lassen. Hierzu verwenden wir in der großkanonischen freien Energie (4.13) die Taylor-Reihe des Logarithmus (3.84) und erhalten mit der 1-Teilchen-Zustandssumme (3.60)

$$\mathcal{F} = -\frac{1}{\beta} \sum_{n=1}^{\infty} \epsilon^{n+1} \frac{Z_1(n, \beta)}{n} e^{\beta \mu n}. \quad (4.21)$$

Die aus (1.32) resultierende großkanonische Zustandssumme

$$\mathcal{Z} = \exp \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \epsilon^{n+1} \frac{Z_1(n, \beta)}{n} e^{\beta \mu n} \right\} \quad (4.22)$$

stimmt demnach mit der erzeugenden Funktion (3.93) überein, wenn man die Variable z mit der Fugazität $e^{\beta \mu}$ identifiziert:

$$\mathcal{Z} = \mathcal{Z}(\beta, e^{\beta \mu}). \quad (4.23)$$

Damit folgt aus (3.89) eine Beziehung, wie man aus der Kenntnis aller kanonischen Zustandssummen $Z_N(\beta)$ die großkanonische Zustandssumme \mathcal{Z} berechnen kann:

$$\mathcal{Z} = \sum_{N=0}^{\infty} Z_N(\beta) e^{\beta \mu N}. \quad (4.24)$$

Hierbei läßt sich die Beziehung (4.24) auch umgekehrt interpretieren. Hat man eine großkanonische Zustandssumme \mathcal{Z} berechnet, und führt man eine Taylor-Entwicklung nach der Fugazität $z = e^{\beta \mu}$ durch, dann sind die Taylor-Koeffizienten mit den kanonischen Zustandssummen $Z_N(\beta)$ zu identifizieren. Hierbei ist die Zustandssumme $Z_0(\beta)$ des Vakuums, bei dem keine Teilchen vorliegen, gemäß (3.94) zu identifizieren.

4.2 Schrödinger-Feldtheorie für Bosonen

In den folgenden Abschnitten werden wir zeigen, daß die statistischen Größen nichtwechselwirkender identischer Teilchen im großkanonischen Ensemble mit Hilfe von Funktionalintegralen berechnet werden können. Hierzu verallgemeinern wir heuristisch das Ergebnis (2.110), nach dem sich die Zustandssumme eines einzelnen Teilchens durch eine Summation über Boltzmann-Faktoren mit der euklidischen Wirkung (2.109) über alle periodischen Wege (2.112) ergibt. Als Ergebnis werden wir für die großkanonische Zustandssumme das folgende Funktionalintegral erhalten:

$$\mathcal{Z} = \oint \mathcal{D}\psi^* \oint \mathcal{D}\psi e^{-\mathcal{A}[\psi^*, \psi]/\hbar}. \quad (4.25)$$

Hierbei werden wir näher definieren müssen, wie man die Funktionalintegration über alle Schrödinger-Felder ψ^*, ψ konkret durchführt. Ferner müssen wir uns der Frage zuwenden, worin sich diese Funktionalintegration für Bosonen und Fermionen im einzelnen unterscheidet, so daß sich

die unterschiedlichen Ergebnisse für die großkanonische Zustandssumme (4.12) ergeben. Schließlich müssen wir festlegen, welche euklidische Wirkung $\mathcal{A}[\psi^*, \psi]$ in (4.25) zu verwenden ist.

Zur Klärung der letzten Frage entwickeln wir zunächst die klassische Feldtheorie der nichtrelativistischen Quantenmechanik für Bosonen. Hierzu betrachten wir das nichtrelativistische Schrödinger-Feld $\psi(\mathbf{x}, t)$ und dessen Adjugium $\psi^*(\mathbf{x}, t)$ als voneinander unabhängige Felder und leiten ausgehend von den Bewegungsgleichungen

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + V(\mathbf{x}) \right\} \psi(\mathbf{x}, t), \quad (4.26)$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\mathbf{x}, t) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + V(\mathbf{x}) \right\} \psi^*(\mathbf{x}, t) \quad (4.27)$$

das zugrunde liegende Variationsverfahren ab. Multipliziert man (4.26) mit $\delta\psi^*(\mathbf{x}, t)$ und (4.27) mit $\delta\psi(\mathbf{x}, t)$ und addiert man beide Gleichungen, so führt eine Integration über die Raum-Zeit-Koordinaten auf

$$\int dt \int d^D x \left\{ i\hbar \left[\delta\psi^*(\mathbf{x}, t) \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) - \delta\psi(\mathbf{x}, t) \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\mathbf{x}, t) \right] + \frac{\hbar^2}{2M} \left[\delta\psi^*(\mathbf{x}, t) \Delta \psi(\mathbf{x}, t) + \delta\psi(\mathbf{x}, t) \Delta \psi^*(\mathbf{x}, t) \right] - V(\mathbf{x}) \delta \left[\psi^*(\mathbf{x}, t) \psi(\mathbf{x}, t) \right] \right\} = 0. \quad (4.28)$$

Die beiden Terme mit den zeitlichen und räumlichen Ableitungen werden nun durch geeignete partielle Integrationen umgeformt. Die dabei entstehenden Randterme tragen nicht bei, da die Variationen der Felder $\delta\psi(\mathbf{x}, t)$ und $\delta\psi^*(\mathbf{x}, t)$ an den Rändern der Raum-Zeit-Integrale verschwinden sollen. Außerdem wird die Rechenregel verwendet, daß die Variation und die partielle Ableitung eines Feldes miteinander vertauschen. Damit erhalten wir

$$\int dt \int d^D x \left[\delta\psi^*(\mathbf{x}, t) \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) - \delta\psi(\mathbf{x}, t) \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\mathbf{x}, t) \right] = \delta \int dt \int d^D x \psi^*(\mathbf{x}, t) \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \quad (4.29)$$

und entsprechend

$$\int dt \int d^D x \left[\delta\psi^*(\mathbf{x}, t) \Delta \psi(\mathbf{x}, t) + \delta\psi(\mathbf{x}, t) \Delta \psi^*(\mathbf{x}, t) \right] = -\delta \int dt \int d^D x \nabla \psi^*(\mathbf{x}, t) \nabla \psi(\mathbf{x}, t). \quad (4.30)$$

Setzt man (4.29) und (4.30) in (4.28) ein, so erhält man ein Variationsverfahren der Form

$$\delta \mathcal{A}[\psi^*, \psi] = 0. \quad (4.31)$$

Es stellt das Hamiltonsche Prinzip in der Lagrangeschen Formulierung der klassischen Feldtheorie dar. Dabei ist die Wirkung $\mathcal{A}[\psi^*, \psi]$ durch das Raum-Zeit-Integral

$$\mathcal{A}[\psi^*, \psi] = \int dt \int d^D x \mathcal{L} \left(\psi^*(\mathbf{x}, t), \nabla \psi^*(\mathbf{x}, t), \frac{\partial \psi^*(\mathbf{x}, t)}{\partial t}; \psi(\mathbf{x}, t), \nabla \psi(\mathbf{x}, t), \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \right) \quad (4.32)$$

gegeben, und die Lagrange-Dichte \mathcal{L} des Schrödinger-Feldes lautet:

$$\mathcal{L} = i\hbar \psi^*(\mathbf{x}, t) \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2M} \nabla \psi^*(\mathbf{x}, t) \nabla \psi(\mathbf{x}, t) - V(\mathbf{x}) \psi^*(\mathbf{x}, t) \psi(\mathbf{x}, t). \quad (4.33)$$

Ist umgekehrt das Variationsprinzip (4.31) mit der Wirkung (4.32), (4.33) gegeben, so lassen sich die ursprünglichen Bewegungsgleichungen (4.26), (4.27) folgendermaßen rekonstruieren. Mit Hilfe der Funktionalableitungen nach den Feldern und der Kettenregel der Differentiation erhalten wir zunächst

$$\delta\mathcal{A}[\psi^*, \psi] = \int dt \int d^D x \left\{ \frac{\delta\mathcal{A}}{\delta\psi^*(\mathbf{x}, t)} \delta\psi^*(\mathbf{x}, t) + \frac{\delta\mathcal{A}}{\delta\psi(\mathbf{x}, t)} \delta\psi(\mathbf{x}, t) \right\} = 0. \quad (4.34)$$

Da die Variationen der Felder $\delta\psi^*(\mathbf{x}, t)$ und $\delta\psi(\mathbf{x}, t)$ unabhängig voneinander durchgeführt werden, resultieren aus (4.34) die Feldgleichungen

$$\frac{\delta\mathcal{A}}{\delta\psi^*(\mathbf{x}, t)} = 0, \quad \frac{\delta\mathcal{A}}{\delta\psi(\mathbf{x}, t)} = 0. \quad (4.35)$$

Nun werden die Funktionalableitungen der Wirkung (4.32) nach den Feldern $\psi^*(\mathbf{x}, t)$ und $\psi(\mathbf{x}, t)$ berechnet. Dabei werden Funktionalableitung und partielle Ableitung miteinander vertauscht und Randterme bei der partielle Integration weggelassen. Als Ergebnis erhalten wir die Euler-Lagrange-Gleichungen der klassischen Feldtheorie:

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\psi(\mathbf{x}, t)} - \nabla \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\nabla\psi(\mathbf{x}, t)} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\frac{\partial\psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t}} = 0, \quad (4.36)$$

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\psi^*(\mathbf{x}, t)} - \nabla \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\nabla\psi^*(\mathbf{x}, t)} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\frac{\partial\psi^*(\mathbf{x}, t)}{\partial t}} = 0. \quad (4.37)$$

Die Lagrange-Dichte des Schrödinger-Feldes (4.33) führt auf die folgenden partielle Ableitungen:

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\psi(\mathbf{x}, t)} = -V(\mathbf{x}) \psi^*(\mathbf{x}, t), \quad \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\psi^*(\mathbf{x}, t)} = -V(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}, t) + i\hbar \frac{\partial\psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t}, \quad (4.38)$$

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\nabla\psi(\mathbf{x}, t)} = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla\psi^*(\mathbf{x}, t), \quad \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\nabla\psi^*(\mathbf{x}, t)} = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla\psi(\mathbf{x}, t), \quad (4.39)$$

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\frac{\partial\psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t}} = i\hbar \psi^*(\mathbf{x}, t), \quad \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\frac{\partial\psi^*(\mathbf{x}, t)}{\partial t}} = 0. \quad (4.40)$$

Damit gehen die Euler-Lagrange-Gleichungen (4.36), (4.37) tatsächlich in die ursprünglichen Bewegungsgleichungen (4.26), (4.27) über. Die hier vorgestellte Lagrangesche Formulierung der Schrödinger-Feldtheorie kann auch in eine Hamiltonsche Formulierung überführt werden, die als Ausgangspunkt für die kanonische Feldquantisierung dient [11].

4.3 Grassmann-Felder

Es stellt sich nun die Frage, ob man auch eine Schrödinger-Feldtheorie für Fermionen entwickeln kann. Dies ist in der Tat möglich, wenn man antikommutierende Grassmann-Felder verwendet. Als Vorbereitung hierzu stellen wir zunächst das Konzept der antikommutierenden Grassmann-Zahlen

vor, das schon in der Mitte des 19ten Jahrhunderts vom Mathematiker Hermann Grassmann eingeführt wurde [11].

Die Gesamtheit der antikommutierenden Grassmann-Zahlen bezeichnet man als Grassmann-Algebra. Jedes Element einer Grassmann-Algebra der Dimension n läßt sich durch einen Satz von n Generatoren bzw. Grassmann-Variablen ψ_i ausdrücken, wobei der Index i von 1 bis n läuft. Die Grassmann-Algebra wird durch die Forderung der Antikommutatorrelationen

$$\left[\psi_i, \psi_j \right]_+ = \psi_i \psi_j + \psi_j \psi_i = 0 \quad (4.41)$$

für alle i, j festgelegt. Als Spezialfall aus (4.41) folgt offensichtlich, daß das Quadrat und alle höheren Potenzen eines Generators verschwinden:

$$\psi_i^2 = 0. \quad (4.42)$$

Das hat zur Konsequenz, daß sich jedes Element der Grassmann-Algebra in eine endliche Summe über Produkte der Generatoren entwickeln läßt:

$$\begin{aligned} f(\psi_1, \dots, \psi_n) &= f^{(0)} + \sum_{i=1}^n f_i^{(1)} \psi_i + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{i-1} f_{ij}^{(2)} \psi_i \psi_j + \dots \\ &+ \sum_{i=1}^n f_i^{(n-1)} \psi_1 \cdots \psi_{i-1} \psi_{i+1} \cdots \psi_n + f^{(n)} \psi_1 \cdots \psi_n, \end{aligned} \quad (4.43)$$

wobei die jeweiligen Koeffizienten $f^{(0)}, f_i^{(1)}, f_{ij}^{(2)}, \dots, f_i^{(n-1)}, f^{(n)}$ komplexe Zahlen sind. Bei der Summation ist zu beachten, daß es wegen der Antikommutatorrelationen (4.41) ausreicht, die Indizes der Generatoren in einer aufsteigenden Reihenfolge zu ordnen, also z.B. $i > j$ beim dritten Term. Dies verringert die Zahl der unabhängigen Produkte von p Generatoren auf den Binomialkoeffizienten

$$n_p = \binom{n}{p}. \quad (4.44)$$

Beispielsweise erhält man für $p = 0, 1, 2, \dots, n-1, n$:

$$\begin{aligned} n_0 = 1 &= \binom{n}{0}, \quad n_1 = \sum_{i=1}^n 1 = n = \binom{n}{1}, \quad n_2 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{i-1} 1 = \frac{1}{2} n(n-1) = \binom{n}{2}, \\ \dots \quad n_{n-1} &= \sum_{i=1}^n 1 = n = \binom{n}{n-1}, \quad n_n = 1 = \binom{n}{n}. \end{aligned} \quad (4.45)$$

Die Dimension der Grassmann-Algebra, d.h. die maximale Zahl der linear unabhängigen Terme in der Basisentwicklung (4.43), beträgt aufgrund von (4.44):

$$\sum_{p=0}^n n_p = \sum_{p=0}^n 1^p 1^{n-p} \binom{n}{p} = 2^n. \quad (4.46)$$

Gewöhnliche Variablen	Grassmann-Variablen
$\frac{\partial}{\partial x_i} 1 = 0$	$\frac{\partial}{\partial \psi_i} 1 = 0$
$\frac{\partial x_j}{\partial x_i} = \delta_{ij}$	$\frac{\partial \psi_j}{\partial \psi_i} = \delta_{ij}$
$\frac{\partial}{\partial x_i} (x_j x_k) = \delta_{ij} x_k + \delta_{ik} x_j$	$\frac{\partial}{\partial \psi_i} (\psi_j \psi_k) = \delta_{ij} \psi_k - \delta_{ik} \psi_j$
$\frac{\partial}{\partial x_i} [x_j f(x_1, \dots, x_n)] = \delta_{ij} f(x_1, \dots, x_n) + x_j \frac{\partial f(x_1, \dots, x_n)}{\partial x_i}$	$\frac{\partial}{\partial \psi_i} [\psi_j f(\psi_1, \dots, \psi_n)] = \delta_{ij} f(\psi_1, \dots, \psi_n) - \psi_j \frac{\partial f(\psi_1, \dots, \psi_n)}{\partial \psi_i}$
$\left[\frac{\partial}{\partial x_i}, x_j \right]_- = \frac{\partial}{\partial x_i} x_j - x_j \frac{\partial}{\partial x_i} = \delta_{ij}$	$\left[\frac{\partial}{\partial \psi_i}, \psi_j \right]_+ = \frac{\partial}{\partial \psi_i} \psi_j + \psi_j \frac{\partial}{\partial \psi_i} = \delta_{ij}$
$\left[\frac{\partial}{\partial x_i}, \frac{\partial}{\partial x_j} \right]_- = \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial}{\partial x_i} = 0$	$\left[\frac{\partial}{\partial \psi_i}, \frac{\partial}{\partial \psi_j} \right]_+ = \frac{\partial}{\partial \psi_i} \frac{\partial}{\partial \psi_j} + \frac{\partial}{\partial \psi_j} \frac{\partial}{\partial \psi_i} = 0$

Abbildung 4.1: Vergleich der Rechenregeln zwischen der Differentiation nach gewöhnlichen Variablen und der Differentiation nach Grassmann-Variablen.

Eine Grassmann-Funktion bildet eine Grassmann-Zahl (4.43) wieder auf eine Grassmann-Zahl (4.43) ab. Als Beispiel betrachten wir die Grassmann-Algebra vom Grade 2 mit den Generatoren ψ_1 und ψ_2 , die die Dimension $2^2 = 4$ besitzt. Eine Grassmann-Zahl f läßt sich dann darstellen als

$$f(\psi_1, \psi_2) = f^{(0)} + f_1^{(1)} \psi_1 + f_2^{(1)} \psi_2 + f^{(2)} \psi_1 \psi_2. \quad (4.47)$$

Mit Hilfe der Taylor-Reihe und (4.41) gilt beispielsweise

$$e^{\psi_1 + \psi_2} = 1 + \psi_1 + \psi_2, \quad (4.48)$$

$$e^{\psi_1 \psi_2} = 1 + \psi_1 \psi_2. \quad (4.49)$$

Besteht eine Grassmann-Zahl f nur aus einer geraden Anzahl von Generatoren, so kommutiert sie mit allen Grassmann-Zahlen und man ordnet ihr die Parität $\pi(f) = 0$ zu. Besteht eine Grassmann-Zahl f dagegen nur aus einer ungeraden Anzahl von Generatoren, so antikommutiert sie mit solchen Grassmann-Zahlen, die auch eine ungerade Anzahl von Generatoren besitzen, und man ordnet ihr die Parität $\pi(f) = 1$ zu. Grassmann-Zahlen, die sowohl eine gerade als auch eine ungerade Anzahl von Generatoren beinhalten, kann man keine Parität zuordnen. Beispielsweise ist $\pi(\psi_1) = \pi(\psi_2) = 1$ und $\pi(e^{\psi_1 \psi_2}) = 0$ nach (4.49), während man $e^{\psi_1 + \psi_2}$ nach (4.48) keine Parität zuordnen kann.

In einer Grassmann-Algebra kann man die Operationen des Differenzierens und Integrierens einführen. Dabei handelt es sich um abstrakte Konstruktionen, bei denen Eigenschaften auftreten, die von der gewohnten Differential- und Integralrechnung im Reellen oder Komplexen zum Teil beträchtlich abweichen. Im Vergleich zur Differentiation nach gewöhnlichen Variablen wird die Differentiation nach Grassmann-Variablen durch die Regeln in Abbildung 4.1 festgelegt. Als Beispiel betrachten wir wieder die Grassmann-Algebra vom Grade 2. Für die jeweiligen Ableitungen

Gewöhnliche Variable	Grassmann-Variablen
$\int_{-\infty}^{\infty} dx [\alpha f(x) + \beta g(x)] = \alpha \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) + \beta \int_{-\infty}^{\infty} dx g(x)$	$\int d\psi [\alpha f(\psi) + \beta g(\psi)] = \alpha \int d\psi f(\psi) + \beta \int d\psi g(\psi)$
$\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x + x_0) = \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x)$	$\int d\psi f(\psi + \psi_0) = \int d\psi f(\psi)$

Abbildung 4.2: Linearität und Translationsinvarianz als definierende Eigenschaften der Integration nach Grassmann-Variablen im Vergleich zur Integration nach gewöhnlichen Variablen.

von (4.47) erhalten wir

$$\frac{\partial f(\psi_1, \psi_2)}{\partial \psi_1} = f_1^{(1)} + f^{(2)} \psi_2, \quad \frac{\partial f(\psi_1, \psi_2)}{\partial \psi_2} = f_2^{(1)} - f^{(2)} \psi_1, \quad (4.50)$$

$$\frac{\partial^2 f(\psi_1, \psi_2)}{\partial \psi_1^2} = \frac{\partial^2 f(\psi_1, \psi_2)}{\partial \psi_2^2} = 0, \quad \frac{\partial^2 f(\psi_1, \psi_2)}{\partial \psi_1 \partial \psi_2} = -f^{(2)} = -\frac{\partial^2 f(\psi_1, \psi_2)}{\partial \psi_2 \partial \psi_1}. \quad (4.51)$$

Entsprechend ergeben sich die Ableitungen von (4.48) und (4.49):

$$\frac{\partial e^{\psi_1 + \psi_2}}{\partial \psi_1} = 1, \quad \frac{\partial e^{\psi_1 + \psi_2}}{\partial \psi_2} = 1, \quad (4.52)$$

$$\frac{\partial e^{\psi_1 \psi_2}}{\partial \psi_1} = \psi_2, \quad \frac{\partial e^{\psi_1 \psi_2}}{\partial \psi_2} = -\psi_1. \quad (4.53)$$

Beim Versuch, eine Integration über Grassmann-Variablen einzuführen, muß man auf viele der gewohnten Eigenschaften im Reellen verzichten. Die Integration über Grassmann-Variablen kann nicht über die Riemannsche Summe definiert werden, da es keine anschauliche Interpretation als Fläche unter einer Kurve gibt. Sie kann aber auch nicht über die Invertierung der Differentiation definiert werden, da Integrationsgrenzen keinen Sinn haben. Wir betrachten zunächst den Fall einer einzelnen Grassmann-Variablen ψ mit der Eigenschaft

$$[\psi, \psi]_+ = 0. \quad (4.54)$$

Dann ist eine Grassmann-Funktion f dieser Grassmann-Variablen ψ gegeben durch

$$f(\psi) = a + b \psi. \quad (4.55)$$

Man definiert nun das Integral $\int d\psi f(\psi)$ gemäß Abbildung 4.2 so, daß dessen Eigenschaften dem bestimmten Integral $\int_{-\infty}^{+\infty} dx f(x)$ gewöhnlicher Funktionen $f(x)$ ähnelt, die im Unendlichen verschwinden. Aus der Forderung nach Linearität und Translationsinvarianz der Integration folgt

$$\int d\psi [a + b(\psi + \psi_0)] = \int d\psi (a + b\psi) + b \left(\int d\psi 1 \right) \psi_0 = \int d\psi (a + b\psi), \quad (4.56)$$

so daß wir folgende wichtige Integrationsregel ablesen:

$$\int d\psi 1 = 0. \quad (4.57)$$

Diese Integrationsregel wird noch ergänzt durch die willkürliche Normierung

$$\int d\psi \psi = 1. \quad (4.58)$$

Vergleicht man diese Integrationsregeln (4.57), (4.58) mit den entsprechenden Differentiationsregeln (siehe Abbildung 4.1)

$$\frac{d}{d\psi} 1 = 0, \quad \frac{d}{d\psi} \psi = 1, \quad (4.59)$$

so sieht man, daß im Raum der Grassmann-Zahlen Integration und Differentiation dasselbe sind. Beispielsweise erhalten wir für die Funktion (4.55):

$$\int d\psi f(\psi) = b, \quad \frac{d}{d\psi} f(\psi) = b. \quad (4.60)$$

Die Verallgemeinerung der Integrationsregeln (4.57), (4.58) auf den Fall einer mehrdimensionalen Grassmann-Algebra mit den Generatoren ψ_i mit $i = 1, \dots, n$ erfolgt durch

$$\int d\psi_i 1 = 0, \quad \int d\psi_i \psi_j = \delta_{ij}, \quad (4.61)$$

was den Differentiationsregeln in Abbildung 4.1 entspricht. Mehrfache Integrale werden in der üblichen Weise durch Hintereinanderausführung der zugrunde liegenden eindimensionalen Integrationen berechnet. Als Beispiel betrachten wir das Integral über die Funktion (4.47):

$$\int d\psi_2 \int d\psi_1 f(\psi_1, \psi_2) = f^{(2)}. \quad (4.62)$$

Eine Vielfachintegration bewirkt demnach gerade das Herausprojizieren des entsprechenden Koeffizienten in der Reihenentwicklung (4.43) der Grassmann-Funktion

$$\int d\psi_n \dots \int d\psi_1 f(\psi_1, \dots, \psi_n) = f^{(n)}. \quad (4.63)$$

Im Hinblick auf die Behandlung von fermionischen Vielteilchenproblemen im großkanonischen Ensemble ist es sinnvoll, komplexe Grassmann-Variablen einzuführen. Man betrachtet hierzu zwei disjunkte Sätze von Grassmann-Variablen ψ_1, \dots, ψ_n und $\psi_1^*, \dots, \psi_n^*$, die miteinander antikommutieren:

$$[\psi_i, \psi_j]_+ = [\psi_i^*, \psi_j^*]_+ = [\psi_i, \psi_j^*]_+ = 0. \quad (4.64)$$

Diese Generatoren bilden zusammen eine $2n$ -dimensionale Grassmann-Algebra. Die beiden Sätze ψ_1, \dots, ψ_n und $\psi_1^*, \dots, \psi_n^*$ werden über eine Konjugations-Operation miteinander verknüpft:

$$(\psi_i)^* = \psi_i^*, \quad (\psi_i^*)^* = \psi_i, \quad (\psi_{i_1} \psi_{i_2} \dots \psi_{i_n})^* = \psi_{i_n}^* \dots \psi_{i_2}^* \psi_{i_1}^*, \quad (\lambda \psi_i)^* = \lambda^* \psi_i^*, \quad (4.65)$$

wobei λ eine komplexe Zahl ist. Bei der Differentiation und Integration werden die beiden Sätze ψ_1, \dots, ψ_n und $\psi_1^*, \dots, \psi_n^*$ als unabhängige Variablen behandelt.

Um die komplexen Grassmann-Variablen in der Feldtheorie anzuwenden, muß man antikommutierende Felder einführen, also den Kontinuumslikes $\psi_i \rightarrow \psi(x)$ und $\psi_i^* \rightarrow \psi^*(x)$ betrachten. Die Antikommutatorrelationen (4.64) gehen dann über in

$$\left[\psi(x), \psi(x') \right]_+ = \left[\psi^*(x), \psi^*(x') \right]_+ = \left[\psi(x), \psi^*(x') \right]_+ = 0. \quad (4.66)$$

Damit bilden die antikommutierenden Felder $\psi(x)$ und $\psi^*(x)$ die Generatoren einer unendlich dimensionalen Grassmann-Algebra. Ein beliebiges Element dieser Algebra stellt dann ein Funktional $f[\psi^*, \psi]$ dar, das sich in Verallgemeinerung von (4.43) entwickeln läßt in

$$f[\psi^*, \psi] = f^{(0)} + \int dx_1 \left\{ f_1^{(1)}(x_1) \psi^*(x_1) + f_2^{(1)}(x_1) \psi(x_1) \right\} + \int dx_1 \int dx_2 \\ \times \left\{ f_1^{(2)}(x_1, x_2) \psi^*(x_1) \psi^*(x_2) + f_2^{(2)}(x_1, x_2) \psi^*(x_1) \psi(x_2) + f_3^{(2)}(x_1, x_2) \psi(x_1) \psi(x_2) \right\}. \quad (4.67)$$

In diesem Kontinuumslikes wird die Differentiation nach Grassmann-Variablen zur Funktionalableitung nach komplexen Grassmann-Feldern mit den Regeln

$$\frac{\delta \psi(x)}{\delta \psi(x')} = \frac{\delta \psi^*(x)}{\delta \psi^*(x')} = \delta(x - x'), \quad \frac{\delta \psi(x)}{\delta \psi^*(x')} = \frac{\delta \psi^*(x)}{\delta \psi(x')} = 0. \quad (4.68)$$

4.4 Schrödinger-Feldtheorie für Fermionen

Wir entwickeln nun eine klassische Feldtheorie für den Fall, daß die Schrödinger-Felder $\psi^*(\mathbf{x}, t)$ und $\psi(\mathbf{x}, t)$ antikommutierende Grassmann-Felder sind. Wie im bosonischen Fall ist die Wirkung durch das Raum-Zeit-Integral (4.32) und die Lagrange-Dichte durch (4.33) gegeben. Das Hamiltonsche Prinzip der Lagrangeschen Formulierung der klassischen Feldtheorie (4.34) führt wegen der Beliebigkeit der Variationen der Grassmann-Felder $\psi^*(\mathbf{x}, t)$ und $\psi(\mathbf{x}, t)$ auf die Feldgleichungen (4.35). Die Berechnung der Funktionalableitungen der Wirkung (4.32) nach den Grassmann-Feldern $\psi^*(\mathbf{x}, t)$ und $\psi(\mathbf{x}, t)$ erfolgt wie im bosonischen Fall und führt auch auf die Euler-Lagrange-Gleichungen (4.36), (4.37). Ein Unterschied der Schrödinger-Feldtheorie für Bosonen und Fermionen tritt erst bei der Berechnung der partiellen Ableitungen der Lagrange-Dichte (4.33) auf. Im Unterschied zu (4.38)–(4.40) erhalten wir bei Fermionen:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi(\mathbf{x}, t)} = V(\mathbf{x}) \psi^*(\mathbf{x}, t), \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi^*(\mathbf{x}, t)} = -V(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}, t) + i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t}, \quad (4.69)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla \psi(\mathbf{x}, t)} = \frac{\hbar^2}{2M} \nabla \psi^*(\mathbf{x}, t), \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla \psi^*(\mathbf{x}, t)} = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla \psi(\mathbf{x}, t), \quad (4.70)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t}} = -i\hbar \psi^*(\mathbf{x}, t), \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{\partial \psi^*(\mathbf{x}, t)}{\partial t}} = 0. \quad (4.71)$$

Trotz unterschiedlicher Vorzeichen resultieren aus (4.36), (4.37) und (4.69)–(4.71) dieselben Bewegungsgleichungen (4.26), (4.27) wie im bosonischen Fall.

4.5 Funktionalintegral

Nun endlich können wir die bei (4.25) geäußerte Frage beantworten, welche euklidische Wirkung $\mathcal{A}[\psi^*, \psi]$ im Funktionalintegral zur großkanonischen Zustandssumme auftritt. Zum einen müssen wir in (4.32), (4.33) durch eine Wick-Rotation $t = -i\tau$ von der Realzeit t zur Imaginärzeit τ übergehen und erhalten:

$$\mathcal{A}[\psi^*, \psi] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \psi^*(\mathbf{x}, \tau) \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta + V(\mathbf{x}) \right] \psi(\mathbf{x}, \tau). \quad (4.72)$$

Der Vergleich mit (2.53) zeigt, daß in (4.72) die mittlere Energie der bosonischen bzw. fermionischen Schrödinger-Felder $\psi^*(\mathbf{x}, t)$ und $\psi(\mathbf{x}, t)$ auftritt:

$$\mathcal{A}[\psi^*, \psi] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \psi^*(\mathbf{x}, \tau) \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} + \hat{H}(\mathbf{x}) \right] \psi(\mathbf{x}, \tau). \quad (4.73)$$

Zum anderen müssen wir berücksichtigen, daß im großkanonischen Ensemble die Energie um einen Beitrag zu vermindern ist, der den Teilchenaustausch mit der Umgebung beschreibt (siehe Beginn von Kapitel 4). Demnach ist von (4.73) das chemische Potential μ multipliziert mit der mittleren Teilchenzahl des bosonischen bzw. fermionischen Schrödinger-Feldes $\psi^*(\mathbf{x}, t)$, $\psi(\mathbf{x}, t)$ abzuziehen:

$$\mathcal{A}[\psi^*, \psi] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \psi^*(\mathbf{x}, \tau) \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} + \hat{H}(\mathbf{x}) - \mu \right] \psi(\mathbf{x}, \tau). \quad (4.74)$$

Demnach handelt es sich bei (4.25), (4.74) um ein Gaußsches Funktionalintegral für die großkanonische Zustandssumme \mathcal{Z} .

Im Hinblick auf die später zu behandelnden Korrelationsfunktionen erweitern wir nun das Funktionalintegral (4.25) und betrachten das erzeugende Funktional

$$\mathcal{Z}[j^*, j] = \oint \mathcal{D}\psi^* \oint \mathcal{D}\psi e^{-\mathcal{A}[\psi^*, \psi; j^*, j]/\hbar}. \quad (4.75)$$

Die dabei auftretende euklidische Wirkung

$$\mathcal{A}[\psi^*, \psi; j^*, j] = \mathcal{A}[\psi^*, \psi] - \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \left\{ j^*(\mathbf{x}, \tau) \psi(\mathbf{x}, \tau) + \psi^*(\mathbf{x}, \tau) j(\mathbf{x}, \tau) \right\} \quad (4.76)$$

besteht neben (4.74) noch aus Termen, bei denen die bosonischen bzw. fermionischen Felder $\psi^*(\mathbf{x}, \tau)$, $\psi(\mathbf{x}, \tau)$ an bosonische bzw. fermionische Stromfelder $j^*(\mathbf{x}, \tau)$, $j(\mathbf{x}, \tau)$ koppeln. Gerade diese Stromterme machen das Funktionalintegral (4.75) zu einem erzeugenden Funktional, mit dem wir später Korrelationsfunktionen berechnen werden.

Man könnte das Funktionalintegral (4.75) durch eine Gitterung der Raum-Zeit in Analogie zur Zeitgitterung des Pfadintegrals in Abschnitt 2.5 definieren. Dies wollen wir hier aber nicht näher ausführen. Statt dessen nutzen wir aus, daß in (4.75) über alle Felder $\psi^*(\mathbf{x}, \tau)$, $\psi(\mathbf{x}, \tau)$ aufzusummieren ist, die bezüglich der Imaginärzeit τ periodisch bzw. antiperiodisch sind:

$$\psi^*(\mathbf{x}, 0) = \epsilon \psi^*(\mathbf{x}, \hbar\beta), \quad \psi(\mathbf{x}, 0) = \epsilon \psi(\mathbf{x}, \hbar\beta). \quad (4.77)$$

Diese Randbedingung stellt einen wesentlichen Unterschied bei der Funktionalintegration für Bosonen ($\epsilon = +1$) und Fermionen ($\epsilon = -1$) dar. In Abschnitt 2.5 hatten wir gesehen, daß die periodische Randbedingung auf eine Matsubara-Zerlegung mit den bosonischen Matsubara-Frequenzen (2.116)

$$\text{Bosonen:} \quad \omega_m = \frac{\pi}{\hbar\beta} 2m; \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (4.78)$$

führte. Ganz entsprechend resultiert aus der antiperiodischen Randbedingung eine Matsubara-Zerlegung mit fermionischen Matsubara-Frequenzen:

$$\text{Fermionen:} \quad \omega_m = \frac{\pi}{\hbar\beta} (2m + 1); \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (4.79)$$

Wir zerlegen nun die im Funktionalintegral (4.75) auftretenden Felder $\psi^*(\mathbf{x}, \tau), \psi(\mathbf{x}, \tau)$ bezüglich des Ortes \mathbf{x} in die 1-Teilchen-Wellenfunktionen $\psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x})$ vom Eigenwertproblem (2.62) und bezüglich der Imaginärzeit τ in Matsubara-Beiträge mit den Matsubara-Frequenzen (4.78), (4.79):

$$\psi^*(\mathbf{x}, \tau) = \sum_{\mathbf{n}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} c_{\mathbf{n}m}^* \psi_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{x}) e^{i\omega_m \tau}, \quad \psi(\mathbf{x}, \tau) = \sum_{\mathbf{n}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} c_{\mathbf{n}m} \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) e^{-i\omega_m \tau}. \quad (4.80)$$

Bei Bosonen bzw. Fermionen sind die Entwicklungskoeffizienten $c_{\mathbf{n}m}^*, c_{\mathbf{n}m}$ gewöhnliche komplexe Zahlen bzw. komplexe Grassmann-Zahlen. Eine Summation über alle periodischen bzw. antiperiodischen Felder $\psi^*(\mathbf{x}, \tau), \psi(\mathbf{x}, \tau)$ entspricht dann einer Summation über alle möglichen Entwicklungskoeffizienten $c_{\mathbf{n}m}^*, c_{\mathbf{n}m}$:

$$\oint \mathcal{D}\psi^* \oint \mathcal{D}\psi = \prod_{\mathbf{n}} \prod_{m=-\infty}^{\infty} \int dc_{\mathbf{n}m}^* \int dc_{\mathbf{n}m} N_{\mathbf{n}m}. \quad (4.81)$$

Hierbei wählen wir die Normierungskonstanten $N_{\mathbf{n}m}$ zu:

$$N_{\mathbf{n}m} = \begin{cases} \frac{\beta}{2\pi} & ; \text{Bosonen,} \\ \frac{1}{\beta} & ; \text{Fermionen.} \end{cases} \quad (4.82)$$

Wir untersuchen nun, wie die euklidische Wirkung (4.74), (4.76) von den Entwicklungskoeffizienten $c_{\mathbf{n}m}^*, c_{\mathbf{n}m}$ abhängt. Beim Einsetzen von (4.80) beachten wir, daß die 1-Teilchen-Wellenfunktionen $\psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x})$ der Orthornomalitätsrelation (2.63) und die Funktionen (2.136) sowohl für bosonische als auch für fermionische Matsubara-Frequenzen (4.78), (4.79) der Orthornomalitätsrelation (2.137) genügen. Damit erhalten wir:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}[\psi^*, \psi; j^*, j] &= \sum_{\mathbf{n}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left\{ \hbar\beta \left(-i\hbar\omega_m + E_{\mathbf{n}} - \mu \right) c_{\mathbf{n}m}^* c_{\mathbf{n}m} \right. \\ &\quad \left. - \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \left[j^*(\mathbf{x}, \tau) \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) e^{-i\omega_m \tau} c_{\mathbf{n}m} + \psi_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{x}) e^{i\omega_m \tau} c_{\mathbf{n}m}^* j(\mathbf{x}, \tau) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.83)$$

Nach (4.75), (4.81), (4.83) faktorisiert das Funktionalintegral für das erzeugende Funktional in gewöhnliche Integrale über die Entwicklungskoeffizienten $c_{\mathbf{n}m}^*, c_{\mathbf{n}m}$:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}[j^*, j] &= \prod_{\mathbf{n}} \prod_{m=-\infty}^{\infty} \int dc_{\mathbf{n}m}^* \int dc_{\mathbf{n}m} N_{\mathbf{n}m} \exp \left\{ -\beta \left(-i\hbar\omega_m + E_{\mathbf{n}} - \mu \right) c_{\mathbf{n}m}^* c_{\mathbf{n}m} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \left[j^*(\mathbf{x}, \tau) \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) e^{-i\omega_m \tau} c_{\mathbf{n}m} + \psi_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{x}) e^{i\omega_m \tau} c_{\mathbf{n}m}^* j(\mathbf{x}, \tau) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.84)$$

Es handelt sich hierbei für jede Quantenzahl \mathbf{n} und für jede Matsubara-Mode m um ein eindimensionales komplexes Gauß-Integral über zwei bosonische bzw. fermionische Variablen $c_{\mathbf{n}m}^*, c_{\mathbf{n}m}$.

Wir betrachten zunächst das eindimensionale komplexe Gauß-Integral über zwei bosonische Variablen ψ^*, ψ von der Form

$$I_1 = \int d\psi^* \int d\psi e^{-(\psi^* A \psi + \eta^* \psi + \psi^* \eta)}. \quad (4.85)$$

Die Zerlegung von ψ^*, ψ und η^*, η in Real- und Imaginärteil

$$\psi^* = \psi_1 - i\psi_2, \quad \psi = \psi_1 + i\psi_2, \quad \eta^* = \eta_1 - i\eta_2, \quad \eta = \eta_1 + i\eta_2 \quad (4.86)$$

führt dann auf

$$\psi^* A \psi = A (\psi_1^2 + \psi_2^2), \quad \eta^* \psi + \psi^* \eta = 2 (\eta_1 \psi_1 + \eta_2 \psi_2). \quad (4.87)$$

Mit dem Betrag der Jacobi-Determinante der Variablentransformation

$$\left| \text{Det} \begin{pmatrix} \frac{\partial \psi^*}{\partial \psi_1} & \frac{\partial \psi^*}{\partial \psi_2} \\ \frac{\partial \psi}{\partial \psi_1} & \frac{\partial \psi}{\partial \psi_2} \end{pmatrix} \right| = 2 \quad (4.88)$$

faktorisiert das eindimensionale komplexe Gauß-Integral (4.85) in zwei eindimensionale Gauß-Integrale

$$I_1 = 2 \int_{-\infty}^{\infty} d\psi_1 e^{-(A\psi_1^2 + 2\eta_1 \psi_1)} \int_{-\infty}^{\infty} d\psi_2 e^{-(A\psi_2^2 + 2\eta_2 \psi_2)}, \quad (4.89)$$

die sich unmittelbar auswerten lassen:

$$I_1 = \frac{2\pi}{A} e^{\eta^* A^{-1} \eta}. \quad (4.90)$$

Nun betrachten wir das eindimensionale komplexe Gauß-Integral über zwei fermionische Variablen ψ^*, ψ von der Form

$$I_2 = \int d\psi^* \int d\psi e^{-(\psi^* A \psi + \eta^* \psi + \psi^* \eta)}. \quad (4.91)$$

Wegen der Translationsinvarianz der Grassmann-Integrale (siehe Abbildung 4.2) führt die Substitution

$$\psi^*(\chi^*) = \chi^* + \psi_0^*, \quad \psi(\chi) = \chi + \psi_0 \quad (4.92)$$

das Integral (4.91) über in

$$I_2 = \int d\chi^* \int d\chi \exp \left\{ - \left[\chi^* A \chi + (A\psi_0 + \eta)^* \chi + \chi^* (A\psi_0 + \eta) + \psi_0^* A \psi_0 + \eta^* \psi_0 + \psi_0^* \eta \right] \right\}. \quad (4.93)$$

Eine Vereinfachung erfolgt durch die Festlegung

$$\psi_0^* = -A^{-1}\eta^*, \quad \psi_0 = -A^{-1}\eta, \quad (4.94)$$

wodurch (4.93) übergeht in

$$I_2 = e^{\eta^* A^{-1} \eta} \int d\chi^* \int d\chi e^{-\chi^* A \chi}. \quad (4.95)$$

Da die Grassmann-Zahlen χ^*, χ antikommutieren, geht (4.95) über in

$$I_2 = e^{\eta^* A^{-1} \eta} \int d\chi^* \int d\chi (1 + A\chi\chi^*). \quad (4.96)$$

Durch Hintereinanderausführung der einzelnen Grassmann-Integrale folgt aufgrund der Integrationsregeln (4.57), (4.58):

$$I_2 = A e^{\eta^* A^{-1} \eta}. \quad (4.97)$$

Der wesentliche Unterschied zwischen dem bosonischen und dem fermionischen Gauß-Integral (4.85) und (4.91) besteht demnach darin, daß A in (4.90) im Nenner und in (4.97) im Zähler des Vorfaktors auftritt.

Verwenden wir (4.85), (4.90) bzw. (4.91), (4.97), so lassen sich die komplexen Gauß-Integrale in (4.84) berechnen. Unter Berücksichtigung der Normierungskonstanten (4.82) erhalten wir das Ergebnis, daß das erzeugende Funktional die folgende Form besitzt

$$\mathcal{Z}[j^*, j] = \mathcal{Z} \exp \left\{ \frac{1}{\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x \int d^D x' j^*(\mathbf{x}, \tau) G(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') j(\mathbf{x}', \tau') \right\}, \quad (4.98)$$

wobei sowohl die großkanonische Zustandssumme

$$\mathcal{Z} = \prod_{\mathbf{n}} \prod_{m=-\infty}^{\infty} (-i\hbar\omega_m + E_{\mathbf{n}} - \mu)^{-\epsilon} \quad (4.99)$$

als auch die Greensche Funktion

$$G(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{n}} \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) \psi_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{x}') \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\omega_m(\tau-\tau')}}{-i\hbar\omega_m + E_{\mathbf{n}} - \mu} \quad (4.100)$$

eine Matsubara-Zerlegung besitzen. Wir bemerken, daß diese beiden Matsubara-Zerlegungen (4.99), (4.100) gemäß

$$\frac{\partial}{\partial \mu} \ln \mathcal{Z} = \epsilon \beta \int d^D x G(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}, \tau) \quad (4.101)$$

zueinander in Beziehung stehen.

Wir beobachten nun, daß sich die beiden Ergebnisse (4.99) bzw. (4.100) für die großkanonische Zustandssumme bzw. die Greensche Funktion noch auf eine andere Weise interpretieren lassen. Hierzu beachten wir, daß die euklidische Wirkung (4.74) auf die Form

$$\mathcal{A}[\psi^*, \psi] = \hbar \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x \int d^D x' \psi^*(\mathbf{x}, \tau) G^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') \psi(\mathbf{x}', \tau') \quad (4.102)$$

gebracht werden kann. Hierbei ist der Integralkern durch

$$G^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = \frac{1}{\hbar} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(\tau - \tau') \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau'} + \hat{H}(\mathbf{x}') - \mu \right] \quad (4.103)$$

gegeben. Wir untersuchen zunächst das Eigenwertproblem des Integralkernes

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x' G^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') \psi_{\mathbf{n}m}(\mathbf{x}', \tau') = \lambda_{\mathbf{n}m} \psi_{\mathbf{n}m}(\mathbf{x}, \tau), \quad (4.104)$$

wobei die Eigenfunktionen bezüglich der Imaginärzeit periodisch bzw. antiperiodisch sein sollen:

$$\psi_{\mathbf{n}m}(\mathbf{x}, 0) = \epsilon \psi_{\mathbf{n}m}(\mathbf{x}, \hbar\beta). \quad (4.105)$$

Die Lösung des Eigenwertproblems (4.104), (4.105) lautet:

$$\psi_{\mathbf{n}m}(\mathbf{x}, \tau) = \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) e^{-i\omega_m \tau}, \quad (4.106)$$

$$\lambda_{\mathbf{n}m} = -i\hbar\omega_m + E_{\mathbf{n}} - \mu. \quad (4.107)$$

Wir definieren nun den Tracelog des Integralkernes (4.103) als die Summe über die Logarithmen seiner Eigenwerte:

$$\text{Tr} \ln G^{-1} = \sum_{\mathbf{n}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \ln \lambda_{\mathbf{n}m}. \quad (4.108)$$

Dann können wir durch Vergleich von (4.99) mit (4.107), (4.108) feststellen, daß die großkanonische Zustandssumme gerade durch den Tracelog des Integralkernes gegeben ist:

$$\mathcal{Z} = e^{-\epsilon \text{Tr} \ln G^{-1}}. \quad (4.109)$$

Anschließend untersuchen wir, wie der Integralkern (4.103) auf die Greensche Funktion (4.100) wirkt. Zunächst erhalten wir

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau'' \int d^D x'' G^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}'', \tau'') G(\mathbf{x}'', \tau''; \mathbf{x}', \tau') = \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{\mathbf{n}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) \psi_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{x}') e^{-i\omega_m(\tau-\tau')}. \quad (4.110)$$

Die \mathbf{n} -Summe entspricht gerade der Vollständigkeitsrelation (2.64) der 1-Teilchen-Wellenfunktionen $\psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x})$. Außerdem entspricht die m -Summe im Falle der bosonischen Matsubara-Frequenzen (4.78) der Vollständigkeitsrelation (2.138) der Funktionen (2.136). Im Falle der fermionischen Matsubara-Frequenzen (4.79) folgt dagegen mit Hilfe der Poissonschen Summenformel (2.134):

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} x_m(\tau) x_m^*(\tau') = \delta^{(a)}(\tau - \tau'). \quad (4.111)$$

Hierbei bezeichnet $\delta^{(a)}(\tau - \tau')$ die antiperiodisch repetierte Deltafunktion:

$$\delta^{(a)}(\tau - \tau') = \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-1)^n \delta(\tau - \tau' + n\hbar\beta). \quad (4.112)$$

Damit reduziert sich (4.110) auf die Aussage, daß Integralkern und Greensche Funktion zueinander invers sind:

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau'' \int d^D x'' G^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}'', \tau'') G(\mathbf{x}'', \tau''; \mathbf{x}', \tau') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta^{(p/a)}(\tau - \tau'). \quad (4.113)$$

Setzt man (4.103) in (4.113) ein, so läßt sich die Greensche Funktion auch dadurch charakterisieren, daß sie der Schrödinger-Gleichung mit Deltafunktion in Raum und Imaginärzeit als Inhomogenität genügt:

$$-\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} G(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = \left[\hat{H}(\mathbf{x}) - \mu \right] G(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') - \hbar \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta^{(p/a)}(\tau - \tau'). \quad (4.114)$$

4.6 Erzeugendes Funktional

Im folgenden zeigen wir, daß (4.98) im doppelten Sinne ein erzeugendes Funktional darstellt. Zunächst stellen wir fest, daß das erzeugende Funktional (4.98) für verschwindende Ströme die großkanonische Zustandssumme beinhaltet:

$$\mathcal{Z} = \mathcal{Z}[j^*, j] \Big|_{j=0}^{j^*=0}. \quad (4.115)$$

Wir wollen nun die 2-Punkt-Funktion

$$\langle \psi(\mathbf{x}_1, \tau_1) \psi^*(\mathbf{x}_2, \tau_2) \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \oint \mathcal{D}\psi^* \oint \mathcal{D}\psi \psi(\mathbf{x}_1, \tau_1) \psi^*(\mathbf{x}_2, \tau_2) e^{-\mathcal{A}[\psi^*, \psi]/\hbar} \quad (4.116)$$

berechnen. Hierzu fügen wir mit (4.76) die Stromterme in der euklidischen Wirkung hinzu:

$$\langle \psi(\mathbf{x}_1, \tau_1) \psi^*(\mathbf{x}_2, \tau_2) \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \oint \mathcal{D}\psi^* \oint \mathcal{D}\psi \psi(\mathbf{x}_1, \tau_1) \psi^*(\mathbf{x}_2, \tau_2) e^{-\mathcal{A}[\psi^*, \psi; j^*, j]/\hbar} \Big|_{j=0}^{j^*=0}. \quad (4.117)$$

Aufgrund der Identitäten

$$\frac{\delta \mathcal{A}[\psi^*, \psi; j^*, j]}{\delta j(\mathbf{x}, \tau)} = -\epsilon \psi^*(\mathbf{x}, \tau), \quad \frac{\delta \mathcal{A}[\psi^*, \psi; j^*, j]}{\delta j^*(\mathbf{x}, \tau)} = -\psi(\mathbf{x}, \tau) \quad (4.118)$$

lassen sich die Felder $\psi(\mathbf{x}_1, \tau_1)$ und $\psi^*(\mathbf{x}_2, \tau_2)$ im Funktionalintegral (4.117) durch Funktionalableitungen nach Stromfeldern ersetzen:

$$\langle \psi(\mathbf{x}_1, \tau_1) \psi^*(\mathbf{x}_2, \tau_2) \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \oint \mathcal{D}\psi^* \oint \mathcal{D}\psi \frac{\hbar^2 \delta^2}{\delta j(\mathbf{x}_2, \tau_2) \delta j^*(\mathbf{x}_1, \tau_1)} e^{-\mathcal{A}[\psi^*, \psi; j^*, j]/\hbar} \Big|_{j=0}^{j^*=0}. \quad (4.119)$$

Durch Vertauschung von Funktionalintegration und Funktionalableitung folgt mit Hilfe von (4.75):

$$\langle \psi(\mathbf{x}_1, \tau_1) \psi^*(\mathbf{x}_2, \tau_2) \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \frac{\hbar^2 \delta^2 \mathcal{Z}[j^*, j]}{\delta j(\mathbf{x}_2, \tau_2) \delta j^*(\mathbf{x}_1, \tau_1)} \Big|_{j=0}^{j^*=0}. \quad (4.120)$$

Verwenden wir in (4.120) die explizite Form (4.98) des erzeugenden Funktionales, so sehen wir, daß die 2-Punkt-Funktion (4.116) gerade durch die Greensche Funktion gegeben ist:

$$\langle \psi(\mathbf{x}_1, \tau_1) \psi^*(\mathbf{x}_2, \tau_2) \rangle = G(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2). \quad (4.121)$$

Der zweite Weg zur Berechnung der 2-Punkt-Funktion (4.116) beruht darauf, daß Funktionalableitungen nach dem bilokalen Integralkern durchgeführt werden. In direkter Verallgemeinerung der Funktionalableitung lokaler Größen wie beispielsweise

$$\frac{\delta j^*(\mathbf{x}_1, \tau_1)}{\delta j^*(\mathbf{x}_2, \tau_2)} = \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \delta(\tau_1 - \tau_2) = \frac{\delta j(\mathbf{x}_1, \tau_1)}{\delta j(\mathbf{x}_2, \tau_2)} \quad (4.122)$$

liegt es nahe, solche Funktionalableitungen bilokaler Größen durch

$$\frac{\delta G^{-1}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2)}{\delta G^{-1}(\mathbf{x}_3, \tau_3; \mathbf{x}_4, \tau_4)} = \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_3) \delta(\tau_1 - \tau_3) \delta(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_4) \delta(\tau_2 - \tau_4) \quad (4.123)$$

zu definieren. Aufgrund von (4.102) betrachten wir die euklidische Wirkung $\mathcal{A}[\psi^*, \psi]$ als Funktional des Integralkernes und erhalten

$$\frac{\delta \mathcal{A}[\psi^*, \psi]}{\delta G^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau')} = \hbar \psi^*(\mathbf{x}, \tau) \psi(\mathbf{x}', \tau'). \quad (4.124)$$

Damit läßt sich das Produkt der Felder $\psi(\mathbf{x}_1, \tau_1)$ und $\psi^*(\mathbf{x}_2, \tau_2)$ im Funktionalintegral (4.116) durch eine Funktionalableitung nach dem Integralkern ersetzen:

$$\langle \psi(\mathbf{x}_1, \tau_1) \psi^*(\mathbf{x}_2, \tau_2) \rangle = \frac{-\epsilon}{\mathcal{Z}} \int \mathcal{D}\psi^* \int \mathcal{D}\psi \frac{\delta}{\delta G^{-1}(\mathbf{x}_2, \tau_2; \mathbf{x}_1, \tau_1)} e^{-\mathcal{A}[\psi^*, \psi]/\hbar}. \quad (4.125)$$

Durch Vertauschung von Funktionalintegration und Funktionalableitung folgt mit Hilfe von (4.25):

$$\langle \psi(\mathbf{x}_1, \tau_1) \psi^*(\mathbf{x}_2, \tau_2) \rangle = \frac{-\epsilon}{\mathcal{Z}} \frac{\delta \mathcal{Z}}{\delta G^{-1}(\mathbf{x}_2, \tau_2; \mathbf{x}_1, \tau_1)}. \quad (4.126)$$

Setzen wir unser Ergebnis (4.109) für die großkanonische Zustandssumme in (4.126) ein, so erhalten wir

$$\langle \psi(\mathbf{x}_1, \tau_1) \psi^*(\mathbf{x}_2, \tau_2) \rangle = \frac{\delta \text{Tr} \ln G^{-1}}{\delta G^{-1}(\mathbf{x}_2, \tau_2; \mathbf{x}_1, \tau_1)}. \quad (4.127)$$

Um die verbleibende Funktionalableitung auswerten zu können, müssen wir eine explizite Form für den Tracelog gewinnen. Hierzu verwenden wir die Identität

$$\text{Tr} \ln G^{-1} = \text{Tr} \ln [1 + (G^{-1} - 1)] \quad (4.128)$$

und die Taylor-Reihe (3.84) des Logarithmus

$$\text{Tr} \ln G^{-1} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n} \text{Tr} (G^{-1} - 1)^n. \quad (4.129)$$

Damit ist der Tracelog gegeben durch

$$\begin{aligned} \text{Tr} \ln G^{-1} = & \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n} \int_0^{\hbar\beta} d\tau'_1 \cdots \int_0^{\hbar\beta} d\tau'_n \int d^D x'_1 \cdots \int d^D x'_n \left[G^{-1}(\mathbf{x}'_1, \tau'_1; \mathbf{x}'_2, \tau'_2) \right. \\ & \left. - \delta(\mathbf{x}'_1 - \mathbf{x}'_2) \delta(\tau'_1 - \tau'_2) \right] \cdots \left[G^{-1}(\mathbf{x}'_n, \tau'_n; \mathbf{x}'_1, \tau'_1) - \delta(\mathbf{x}'_n - \mathbf{x}'_1) \delta(\tau'_n - \tau'_1) \right]. \end{aligned} \quad (4.130)$$

Einsetzen von (4.130) in (4.127) führt mit (4.123) auf

$$\begin{aligned} \langle \psi(\mathbf{x}_1, \tau_1) \psi^*(\mathbf{x}_2, \tau_2) \rangle &= \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \delta(\tau_1 - \tau_2) - \left[G^{-1}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) - \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \delta(\tau_1 - \tau_2) \right] \\ &+ \int_0^{\hbar\beta} d\tau'_1 \int d^D x'_1 \left[G^{-1}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}'_1, \tau'_1) - \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_1) \delta(\tau_1 - \tau'_1) \right] \\ &\times \left[G^{-1}(\mathbf{x}'_1, \tau'_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) - \delta(\mathbf{x}'_1 - \mathbf{x}_2) \delta(\tau'_1 - \tau_2) \right] + \dots \end{aligned} \quad (4.131)$$

Formal betrachtet stellt (4.131) eine geometrische Reihe dar, die unmittelbar aufsummiert werden kann:

$$\langle \psi(\mathbf{x}_1, \tau_1) \psi^*(\mathbf{x}_2, \tau_2) \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} (-[G^{-1} - 1])^n (\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) = G(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2). \quad (4.132)$$

Damit haben wir das frühere Ergebnis (4.121) reproduziert.

Bei der später zu entwickelnden Störungstheorie wechselwirkender Felder werden in Verallgemeinerung von (4.116) höhere n -Punkt-Funktionen auftreten. Wie bei der hier vorgestellten Berechnung der 2-Punkt-Funktion gibt es mit dem Strom- und dem Integralkernformalismus zwei Möglichkeiten, diese n -Punkt-Funktionen zu berechnen. Der Integralkernformalismus hat gegenüber dem Stromformalismus den Vorteil, dass nur halb so viele Funktionalableitungen erforderlich sind. Außerdem ist der Integralkern sowohl bei Bosonen als auch bei Fermionen keine Grassmann-Variable. Deshalb muß man bei Funktionalableitungen nach dem Integralkern nicht wie bei Funktionalableitungen nach Strömen auf deren Reihenfolge achten.

4.7 Greensche Funktion

Wir berechnen nun die Matsubara-Reihe der Greenschen Funktion (4.100). Zunächst behandeln wir den Fall der Bosonen. Die Anwendung der bosonischen Poissonschen Summenformel (2.135) führt auf

$$G(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = \sum_{n=-\infty}^{\infty} g(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \tau - \tau' + n\hbar\beta), \quad (4.133)$$

wobei die Funktion $g(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \tau)$ gegeben ist durch

$$g(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \tau) = \sum_{\mathbf{n}} \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) \psi_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{x}') \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_m \frac{e^{-i\omega_m \tau}}{\omega_m + i(E_{\mathbf{n}} - \mu)/\hbar}. \quad (4.134)$$

Das ω_m -Integral läßt sich mit dem Residuensatz unter Beachtung von $E_{\mathbf{n}} - \mu \geq 0$ auswerten. Im Falle $\tau > 0$ läßt sich (4.134) über einen Halbkreis in der unteren komplexen ω_m -Ebene berechnen, wo der Integrand einen Pol an der Stelle $\omega_m = -i(E_{\mathbf{n}} - \mu)/\hbar$ besitzt. Entsprechend ist für $\tau < 0$ der Halbkreis in der oberen komplexen ω_m -Ebene zu verwenden, wo der Integrand keinen Pol besitzt. Beide Fälle lassen sich zusammenfassen durch

$$g(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \tau) = \Theta(\tau) \sum_{\mathbf{n}} \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) \psi_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{x}') e^{-(E_{\mathbf{n}} - \mu)\tau/\hbar}. \quad (4.135)$$

Der Vergleich von (3.48) mit (4.135) zeigt, daß die Funktion $g(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \tau)$ bis auf die Heaviside-Funktion $\Theta(\tau)$ gerade der 1-Teilchen-Imaginärzeitentwicklungsamplitude entspricht, bei der die 1-Teilchen-Energien $E_{\mathbf{n}}$ um das chemische Potential μ verschoben sind. Wir halten dieses wichtige Ergebnis formal durch folgende Notation fest:

$$g(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \tau) = \Theta(\tau) (\mathbf{x}, \tau | \mathbf{x}', 0) \Big|_{E \rightarrow E - \mu}. \quad (4.136)$$

Nun setzen wir (4.136) in (4.133) ein und führen die periodische Repetierung explizit durch. Es sei zunächst $\tau - \tau' \in (0, \hbar\beta)$. Dann folgt durch Aufsummation einer geometrischen Reihe:

$$G(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = \sum_{\mathbf{n}} \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) \psi_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{x}') \frac{e^{-(E_{\mathbf{n}} - \mu)(\tau - \tau')/\hbar}}{1 - e^{-\beta(E_{\mathbf{n}} - \mu)}}, \quad \tau - \tau' \in (0, \hbar\beta). \quad (4.137)$$

Entsprechend erhalten wir für $\tau - \tau' \in (-\hbar\beta, 0)$:

$$G(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = \sum_{\mathbf{n}} \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) \psi_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{x}') \frac{e^{-(E_{\mathbf{n}} - \mu)(\tau - \tau')/\hbar}}{e^{\beta(E_{\mathbf{n}} - \mu)} - 1}, \quad \tau - \tau' \in (-\hbar\beta, 0). \quad (4.138)$$

Die beiden Fälle (4.137) (4.138) werden nun zusammengefaßt, so daß die bosonische Greensche Funktion lautet:

$$G(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = \sum_{\mathbf{n}} \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) \psi_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{x}') \times \frac{\Theta(\tau - \tau') e^{-(E_{\mathbf{n}} - \mu)(\tau - \tau' - \hbar\beta/2)/\hbar} + \Theta(\tau' - \tau) e^{-(E_{\mathbf{n}} - \mu)(\tau - \tau' + \hbar\beta/2)/\hbar}}{2 \sinh \beta(E_{\mathbf{n}} - \mu)/2}. \quad (4.139)$$

Wir behandeln nun den Fall der Fermionen. Hierzu spezialisieren wir die Poissonsche Summenformel (2.134) auf eine Funktion $f(m) = F(\omega_m)$, die von den fermionischen Matsubara-Frequenzen (4.79) abhängt:

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} F(\omega_m) = \frac{\hbar\beta}{2\pi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-1)^n \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_m F(\omega_m) e^{-in\hbar\beta\omega_m}. \quad (4.140)$$

Demnach unterscheiden sich die Reihen (2.135) und (4.140) mit bosonischen bzw. fermionischen Matsubara-Frequenzen (4.78) bzw. (4.79) durch den Faktor $(\pm 1)^n$ in der n -Summe. Die Anwendung der fermionischen Poissonschen Summenformel (4.140) führt die Matsubara-Reihe der Greenschen Funktion (4.100) auf

$$G(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-1)^n g(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \tau - \tau' + n\hbar\beta) \quad (4.141)$$

mit derselben Funktion (4.134). Beim Einsetzen von (4.135) in (4.141) führen wir die antiperiodische Repetierung explizit durch und erhalten:

$$G(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = \sum_{\mathbf{n}} \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) \psi_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{x}') \frac{e^{-(E_{\mathbf{n}} - \mu)(\tau - \tau')/\hbar}}{1 + e^{-\beta(E_{\mathbf{n}} - \mu)}}, \quad \tau - \tau' \in (0, \hbar\beta), \quad (4.142)$$

$$G(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = - \sum_{\mathbf{n}} \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) \psi_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{x}') \frac{e^{-(E_{\mathbf{n}} - \mu)(\tau - \tau')/\hbar}}{e^{\beta(E_{\mathbf{n}} - \mu)} + 1}, \quad \tau - \tau' \in (-\hbar\beta, 0). \quad (4.143)$$

Die Zusammenfassung beider Fälle führt auf die fermionische Greensche Funktion

$$G(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = \sum_{\mathbf{n}} \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) \psi_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{x}') \times \frac{\Theta(\tau - \tau') e^{-(E_{\mathbf{n}} - \mu)(\tau - \tau' - \hbar\beta/2)/\hbar} - \Theta(\tau' - \tau) e^{-(E_{\mathbf{n}} - \mu)(\tau - \tau' + \hbar\beta/2)/\hbar}}{2 \cosh \beta(E_{\mathbf{n}} - \mu)/2}. \quad (4.144)$$

Wir beobachten, daß die bosonische und die fermionische Greensche Funktion (4.139) und (4.144) im Limes $\tau \rightarrow \tau'$ unstetig ist. Um diese Mehrdeutigkeit aufzulösen, betrachten wir unser Ergebnis (4.121) für die 2-Punkt-Funktion. Demnach beschreibt die Greensche Funktion $G(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau')$ die physikalische Situation, daß am Raum-Zeit-Punkt (\mathbf{x}', τ') ein Teilchen erzeugt wird und dann zum Raum-Zeit-Punkt (\mathbf{x}, τ) propagiert, wo es wieder vernichtet wird. Von den beiden mathematisch möglichen Limites $\tau' \downarrow \tau$ und $\tau' \uparrow \tau$ ist aufgrund des Kausalitätsprinzips nur der erste physikalisch relevant. Wir definieren daher

$$G(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau) = \lim_{\tau' \downarrow \tau} G(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') \quad (4.145)$$

und erhalten aus (4.139) und (4.144) für $\epsilon = \pm 1$:

$$G(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau) = \epsilon \sum_{\mathbf{n}} \frac{\psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) \psi_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{x}')}{e^{\beta(E_{\mathbf{n}} - \mu)} - \epsilon}. \quad (4.146)$$

Einsetzen von (4.146) in (4.101) führt auf eine Differentialgleichung für die großkanonische Zustandssumme

$$\frac{\partial}{\partial \mu} \ln \mathcal{Z} = \beta \sum_{\mathbf{n}} \frac{1}{e^{\beta(E_{\mathbf{n}} - \mu)} - \epsilon}, \quad (4.147)$$

die durch unser früheres Resultat (4.12) gelöst wird. Die Matsubara-Zerlegung (4.99) für die großkanonische Zustandssumme wurde demnach indirekt dadurch berechnet, daß sie über (4.101) auf die Matsubara-Reihe der Greenschen Funktion zurückgeführt wurde.

Außerdem beobachten wir, daß die Beziehung (4.101) noch eine weitere wichtige physikalische Interpretation besitzt. Mit Hilfe von (1.32) und (1.37) erhalten wir für die Teilchenzahl

$$N = \int d^D x n(\mathbf{x}), \quad (4.148)$$

wobei die Teilchendichte

$$n(\mathbf{x}) = \epsilon G(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}; \tau) \quad (4.149)$$

gemäß (4.146) gegeben ist durch

$$n(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{n}} \frac{\psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) \psi_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{x})}{e^{\beta(E_{\mathbf{n}} - \mu)} - \epsilon}. \quad (4.150)$$

Damit resultiert für die Teilchenzahl der Ausdruck (4.20), der sich mit Hilfe der quantenmechanischen Zustandsdichte (2.222) auch auf die Form

$$N = \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{\rho(E)}{e^{\beta(E - \mu)} - \epsilon} \quad (4.151)$$

bringen läßt.

4.8 Semiklassische Näherung

Nun berechnen wir noch die jeweiligen großkanonischen Größen in der semiklassischen Näherung. Die führende Ordnung der 1-Teilchen-Imaginärzeitentwicklungsamplitude (2.210) lautet

$$(\mathbf{x}, \tau | \mathbf{x}', 0) = \left(\frac{M}{2\pi\hbar\tau} \right)^{D/2} \exp \left\{ -\frac{M}{2\hbar\tau} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^2 - \frac{\tau}{\hbar} V \left(\frac{\mathbf{x} + \mathbf{x}'}{2} \right) \right\} \quad (4.152)$$

und besitzt die Fourier-Darstellung

$$(\mathbf{x}, \tau | \mathbf{x}', 0) = \int \frac{d^D p}{(2\pi\hbar)^D} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \mathbf{p} (\mathbf{x} - \mathbf{x}') - \frac{\tau}{\hbar} \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2M} + V \left(\frac{\mathbf{x} + \mathbf{x}'}{2} \right) \right] \right\}. \quad (4.153)$$

Damit erhalten wir aus (4.136) die semiklassische Näherung

$$g(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \tau) = \Theta(\tau) \int \frac{d^D p}{(2\pi\hbar)^D} e^{i\mathbf{p}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')/\hbar - H(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \mathbf{p})\tau/\hbar} \quad (4.154)$$

mit der Energiefunktion

$$H(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2M} + V \left(\frac{\mathbf{x} + \mathbf{x}'}{2} \right) - \mu. \quad (4.155)$$

Entsprechend ergeben sich die semiklassischen Näherungen der bosonischen Greenschen Funktion (4.139) zu

$$\begin{aligned} G(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') &= \int \frac{d^D p}{(2\pi\hbar)^D} e^{i\mathbf{p}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')/\hbar} \\ &\times \frac{\Theta(\tau - \tau') e^{-H(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \mathbf{p})(\tau - \tau' - \hbar\beta/2)/\hbar} + \Theta(\tau' - \tau) e^{-H(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \mathbf{p})(\tau - \tau' + \hbar\beta/2)/\hbar}}{2 \sinh \beta H(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \mathbf{p})/2} \end{aligned} \quad (4.156)$$

und der fermionischen Greenschen Funktion (4.144) zu

$$\begin{aligned} G(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') &= \int \frac{d^D p}{(2\pi\hbar)^D} e^{i\mathbf{p}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')/\hbar} \\ &\times \frac{\Theta(\tau - \tau') e^{-H(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \mathbf{p})(\tau - \tau' - \hbar\beta/2)/\hbar} - \Theta(\tau' - \tau) e^{-H(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \mathbf{p})(\tau - \tau' + \hbar\beta/2)/\hbar}}{2 \cosh \beta H(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \mathbf{p})/2}. \end{aligned} \quad (4.157)$$

Aufgrund von (4.145), (4.149), (4.156) und (4.157) lautet demnach die semiklassische Näherung der Teilchendichte

$$n(\mathbf{x}) = \int \frac{d^D p}{(2\pi\hbar)^D} \frac{1}{e^{\beta[H(\mathbf{x}, \mathbf{p}) - \mu]} - \epsilon}, \quad (4.158)$$

wobei $H(\mathbf{x}, \mathbf{p})$ die Hamilton-Funktion (2.9) darstellt. Außerdem erhalten wir aus (2.39) und (4.152) für die semiklassische Näherung der 1-Teilchen-Zustandssumme

$$Z_1(\beta) = \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{D/2} \int d^D x e^{-\beta V(\mathbf{x})}. \quad (4.159)$$

Die semiklassische Näherung der großkanonischen freie Energie (4.21) ergibt sich zu

$$\mathcal{F} = \frac{\epsilon}{\beta} \int d^D x \int \frac{d^D p}{(2\pi\hbar)^D} \ln \left\{ 1 - \epsilon e^{-\beta[H(\mathbf{x}, \mathbf{p}) - \mu]} \right\}. \quad (4.160)$$

Damit sind (4.148), (4.158) konsistent mit (1.37), (4.160) und wir erhalten für die Teilchenzahl:

$$N = \int d^D x \int \frac{d^D p}{(2\pi\hbar)^D} \frac{1}{e^{\beta[H(\mathbf{x}, \mathbf{p}) - \mu]} - \epsilon}. \quad (4.161)$$

Mit Hilfe der klassischen Zustandsdichte (2.221) läßt sie sich auf die Form

$$N = \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{\rho_{\text{cl}}(E)}{e^{\beta(E - \mu)} - \epsilon} \quad (4.162)$$

bringen.

4.9 Effektive Wirkung

Wir untersuchen nun die Frage, wie man die thermodynamischen Eigenschaften des Boses-Gases unterhalb des Phasenüberganges im großkanonischen Ensemble berechnet. Dabei identifizieren wir die Kondensation der Bosonen in den Grundzustand damit, daß der großkanonische Ensemblemittelwert der Bose-Felder $\psi^*(\mathbf{x}, \tau)$, $\psi(\mathbf{x}, \tau)$ nicht mehr verschwindet. Um aber einen von Null verschiedenen großkanonischen Ensemblemittelwert beschreiben zu können, müssen wir die Bose-Felder $\psi^*(\mathbf{x}, \tau)$, $\psi(\mathbf{x}, \tau)$ gemäß (4.76) an Stromfelder $j^*(\mathbf{x}, \tau)$, $j(\mathbf{x}, \tau)$ ankoppeln. Aus dem erzeugenden Funktional (4.75) lassen sich dann die großkanonischen Ensemblemittelwerte

$$\Psi^*(\mathbf{x}, \tau) = \frac{1}{\mathcal{Z}[j^*, j]} \oint \mathcal{D}\psi^* \oint \mathcal{D}\psi \psi^*(\mathbf{x}, \tau) e^{-\mathcal{A}[\psi^*, \psi; j^*, j]/\hbar}, \quad (4.163)$$

$$\Psi(\mathbf{x}, \tau) = \frac{1}{\mathcal{Z}[j^*, j]} \oint \mathcal{D}\psi^* \oint \mathcal{D}\psi \psi(\mathbf{x}, \tau) e^{-\mathcal{A}[\psi^*, \psi; j^*, j]/\hbar} \quad (4.164)$$

durch Funktionalableitungen nach den Stromfeldern gewinnen:

$$\Psi^*(\mathbf{x}, \tau) = \frac{\hbar}{\mathcal{Z}[j^*, j]} \frac{\delta \mathcal{Z}[j^*, j]}{\delta j(\mathbf{x}, \tau)}, \quad \Psi(\mathbf{x}, \tau) = \frac{\hbar}{\mathcal{Z}[j^*, j]} \frac{\delta \mathcal{Z}[j^*, j]}{\delta j^*(\mathbf{x}, \tau)}. \quad (4.165)$$

Durch die Ankopplung der Bose-Felder $\psi^*(\mathbf{x}, \tau)$, $\psi(\mathbf{x}, \tau)$ an die Stromfelder $j^*(\mathbf{x}, \tau)$, $j(\mathbf{x}, \tau)$ wird aber auch die großkanonische freie Energie (1.32) zu einem erzeugenden Funktional

$$\mathcal{F}[j^*, j] = -\frac{1}{\beta} \ln \mathcal{Z}[j^*, j] \quad (4.166)$$

und wir erhalten aus (4.165)

$$\Psi^*(\mathbf{x}, \tau) = -\hbar\beta \frac{\delta \mathcal{F}[j^*, j]}{\delta j(\mathbf{x}, \tau)}, \quad \Psi(\mathbf{x}, \tau) = -\hbar\beta \frac{\delta \mathcal{F}[j^*, j]}{\delta j^*(\mathbf{x}, \tau)}. \quad (4.167)$$

Hierbei besagt (4.167), daß die großkanonischen Ensemblemittelwerte $\Psi^*(\mathbf{x}, \tau)$, $\Psi(\mathbf{x}, \tau)$ als Funktionale der Stromfelder $j^*(\mathbf{x}, \tau)$, $j(\mathbf{x}, \tau)$ aufzufassen sind:

$$\Psi^*(\mathbf{x}, \tau) = \Psi^*[j^*, j](\mathbf{x}, \tau), \quad \Psi(\mathbf{x}, \tau) = \Psi[j^*, j](\mathbf{x}, \tau). \quad (4.168)$$

Wir nehmen an, daß (4.168) eindeutig invertiert werden kann. Dann lassen sich umgekehrt die Stromfelder $j^*(\mathbf{x}, \tau)$, $j(\mathbf{x}, \tau)$ als Funktionale der großkanonischen Ensemblemittelwerte $\Psi^*(\mathbf{x}, \tau)$, $\Psi(\mathbf{x}, \tau)$ ansehen:

$$j^*(\mathbf{x}, \tau) = j^*[\Psi^*, \Psi](\mathbf{x}, \tau), \quad j(\mathbf{x}, \tau) = j[\Psi^*, \Psi](\mathbf{x}, \tau). \quad (4.169)$$

Wir verwenden nun die Beziehung (4.167), um eine Legendre-Transformation des großkanonischen freien Energiefunktionales $\mathcal{F}[j^*, j]$ bezüglich der Stromfelder $j^*(\mathbf{x}, \tau)$, $j(\mathbf{x}, \tau)$ durchzuführen. Dies führt auf die effektive Wirkung

$$\begin{aligned} \Gamma[\Psi^*, \Psi] &= \mathcal{F}[j^*[\Psi^*, \Psi], j[\Psi^*, \Psi]] \\ &+ \frac{1}{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \left\{ j^*[\Psi^*, \Psi](\mathbf{x}, \tau) \Psi(\mathbf{x}, \tau) + \Psi^*(\mathbf{x}, \tau) j[\Psi^*, \Psi](\mathbf{x}, \tau) \right\}, \end{aligned} \quad (4.170)$$

die ein Funktional der großkanonischen Ensemblemittelwerte $\Psi^*(\mathbf{x}, \tau)$, $\Psi(\mathbf{x}, \tau)$ darstellt. Die Funktionalableitungen der effektiven Wirkung (4.170) nach den Feldern $\Psi^*(\mathbf{x}, \tau)$, $\Psi(\mathbf{x}, \tau)$ führt auf die folgenden Legendre-Identitäten:

$$\frac{\delta\Gamma[\Psi^*, \Psi]}{\delta\Psi^*(\mathbf{x}, \tau)} = \frac{1}{\hbar\beta} j[\Psi^*, \Psi](\mathbf{x}, \tau), \quad \frac{\delta\Gamma[\Psi^*, \Psi]}{\delta\Psi(\mathbf{x}, \tau)} = \frac{1}{\hbar\beta} j^*[\Psi^*, \Psi](\mathbf{x}, \tau). \quad (4.171)$$

Die thermodynamische Bedeutung der effektiven Wirkung (4.170) wird deutlich, wenn wir den physikalischen Limes betrachten, daß die künstlich eingeführten Stromfelder $j^*(\mathbf{x}, \tau)$, $j(\mathbf{x}, \tau)$ verschwinden:

$$\text{physikalischer Limes:} \quad j^*(\mathbf{x}, \tau) \rightarrow 0, \quad j(\mathbf{x}, \tau) \rightarrow 0. \quad (4.172)$$

In diesem physikalischen Limes strebt die effektive Wirkung (4.170) offensichtlich gegen die großkanonische freie Energie:

$$\Gamma[\Psi^*, \Psi] \rightarrow \mathcal{F}[j^* = 0, j = 0] \equiv \mathcal{F}. \quad (4.173)$$

Dabei ist zu beachten, daß die großkanonischen Ensemblemittelwerte $\Psi^*(\mathbf{x}, \tau)$, $\Psi(\mathbf{x}, \tau)$ in diejenigen Felder $\Psi_e^*(\mathbf{x}, \tau)$, $\Psi_e(\mathbf{x}, \tau)$ übergehen

$$\Psi^*(\mathbf{x}, \tau) \rightarrow \Psi_e^*(\mathbf{x}, \tau), \quad \Psi(\mathbf{x}, \tau) \rightarrow \Psi_e(\mathbf{x}, \tau), \quad (4.174)$$

die aufgrund von (4.171) die effektive Wirkung extremalisieren:

$$\left. \frac{\delta\Gamma[\Psi^*, \Psi]}{\delta\Psi^*(\mathbf{x}, \tau)} \right|_{\Psi=\Psi_e}^{\Psi^*=\Psi_e^*} = 0, \quad \left. \frac{\delta\Gamma[\Psi^*, \Psi]}{\delta\Psi(\mathbf{x}, \tau)} \right|_{\Psi=\Psi_e}^{\Psi^*=\Psi_e^*} = 0. \quad (4.175)$$

Damit ergibt sich die großkanonische freie Energie \mathcal{F} aus dem Extremalwert der effektiven Wirkung $\Gamma[\Psi^*, \Psi]$:

$$\mathcal{F} = \Gamma[\Psi_e^*, \Psi_e]. \quad (4.176)$$

Wir berechnen nun die effektive Wirkung für das ideale Bose-Gas. Hierzu gehen wir vom großkanonischen freien Energiefunktional (4.166) aus, das sich aus (4.98) und (4.109) ablesen läßt:

$$\mathcal{F}[j^*, j] = \frac{1}{\beta} \text{Tr} \ln G^{-1} - \frac{1}{\hbar^2 \beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x \int d^D x' j^*(\mathbf{x}, \tau) G(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') j(\mathbf{x}', \tau'). \quad (4.177)$$

Die großkanonischen Ensemblemittelwerte (4.167) ergeben sich dann zu

$$\Psi^*(\mathbf{x}, \tau) = \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x' j^*(\mathbf{x}', \tau') G(\mathbf{x}', \tau'; \mathbf{x}, \tau), \quad (4.178)$$

$$\Psi(\mathbf{x}, \tau) = \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x' G(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') j(\mathbf{x}', \tau'). \quad (4.179)$$

Die Invertierung von (4.178), (4.179) führt mit (4.113) auf

$$j^*(\mathbf{x}, \tau) = \hbar \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x' \Psi^*(\mathbf{x}', \tau') G^{-1}(\mathbf{x}', \tau'; \mathbf{x}, \tau), \quad (4.180)$$

$$j(\mathbf{x}, \tau) = \hbar \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x' G^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') \Psi(\mathbf{x}', \tau'). \quad (4.181)$$

Mit Hilfe von (4.113), (4.177), (4.180) und (4.181) ergibt sich schließlich die effektive Wirkung (4.170) zu

$$\Gamma[\Psi^*, \Psi] = \frac{1}{\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x \int d^D x' \Psi^*(\mathbf{x}, \tau) G^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') \Psi(\mathbf{x}', \tau') + \frac{1}{\beta} \text{Tr} \ln G^{-1}. \quad (4.182)$$

Der erste Term in (4.182) entspricht der Wirkung (4.102), die an den großkanonischen Ensemblemittelwerten $\Psi^*(\mathbf{x}, \tau)$, $\Psi(\mathbf{x}, \tau)$ ausgewertet wird:

$$\Gamma[\Psi^*, \Psi] = \frac{\mathcal{A}[\Psi^*, \Psi]}{\hbar\beta} + \frac{1}{\beta} \text{Tr} \ln G^{-1}. \quad (4.183)$$

Dieser erste Beitrag zur effektiven Wirkung wird als Baumgraph (=tree level) bezeichnet. Der zweite Term in (4.183) beschreibt als Tracelog den Beitrag zur effektiven Wirkung, der von den Fluktuationen der Felder $\psi^*(\mathbf{x}, \tau)$, $\psi(\mathbf{x}, \tau)$ um die großkanonischen Ensemblemittelwerten $\Psi^*(\mathbf{x}, \tau)$, $\Psi(\mathbf{x}, \tau)$ herrührt.

Mit der expliziten Form (4.103) des Integralkernes lautet (4.182) schließlich

$$\Gamma[\Psi^*, \Psi] = \frac{1}{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \Psi^*(\mathbf{x}, \tau) \left\{ \hbar \frac{\partial}{\partial \tau} + \hat{H}(\mathbf{x}) - \mu \right\} \Psi(\mathbf{x}, \tau) + \frac{1}{\beta} \text{Tr} \ln G^{-1}. \quad (4.184)$$

Die Extremalisierung (4.175) der effektiven Wirkung (4.184) führt auf

$$\left\{ -\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} + \hat{H}(\mathbf{x}) - \mu \right\} \Psi_e^*(\mathbf{x}, \tau) = 0, \quad \left\{ \hbar \frac{\partial}{\partial \tau} + \hat{H}(\mathbf{x}) - \mu \right\} \Psi_e(\mathbf{x}, \tau) = 0. \quad (4.185)$$

Wir konstruieren nun eine Lösung von (4.185), bei der die extremalisierten großkanonischen Ensemblemittelwerte $\Psi_e^*(\mathbf{x}, \tau)$, $\Psi_e(\mathbf{x}, \tau)$ auf die Grundzustandswellenfunktion $\psi_0(\mathbf{x})$ zurückgeführt werden, die durch das Eigenwertproblem

$$\hat{H}(\mathbf{x}) \psi_0(\mathbf{x}) = E_0 \psi_0(\mathbf{x}) \quad (4.186)$$

und die Normierungsbedingung

$$\int d^D x \psi_{\mathbf{0}}^*(\mathbf{x}) \psi_{\mathbf{0}}(\mathbf{x}) = 1 \quad (4.187)$$

charakterisiert ist. Hierzu definieren wir

$$\Psi_e^*(\mathbf{x}, \tau) = \sqrt{N_{\mathbf{0}}} \psi_{\mathbf{0}}^*(\mathbf{x}), \quad \Psi_e(\mathbf{x}, \tau) = \sqrt{N_{\mathbf{0}}} \psi_{\mathbf{0}}(\mathbf{x}) \quad (4.188)$$

mit der Normierungsbedingung

$$\int d^D x \Psi_e^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_e(\mathbf{x}, \tau) = N_{\mathbf{0}}, \quad (4.189)$$

und interpretieren $N_{\mathbf{0}}$ als die Zahl der Bosonen im Grundzustand $\mathbf{n} = \mathbf{0}$. Damit der Ansatz (4.188) eine Lösung von (4.185) ist, muß gelten:

$$(E_{\mathbf{0}} - \mu) \sqrt{N_{\mathbf{0}}} = 0. \quad (4.190)$$

Man hat demnach zwei Fälle zu unterscheiden:

$$1. \text{ Fall:} \quad \mu \neq E_{\mathbf{0}}, \quad N_{\mathbf{0}} = 0, \quad (4.191)$$

$$2. \text{ Fall:} \quad \mu = E_{\mathbf{0}}, \quad N_{\mathbf{0}} \neq 0. \quad (4.192)$$

Der erste Fall (4.191) beschreibt die Hochtemperaturphase, bei der die Bosonen nicht in den Grundzustand kondensiert sind, während der zweite Fall (4.192) die Tieftemperaturphase darstellt, in der ein Bose-Einstein-Kondensat vorliegt. Wir sehen daran, daß man im großkanonischen Ensemble die thermodynamischen Eigenschaften der jeweiligen Phasen separat zu untersuchen hat.

Einsetzen von (4.188) in (4.184) führt mit (4.176) und (4.186) auf die großkanonische freie Energie

$$\mathcal{F} = (E_{\mathbf{0}} - \mu) N_{\mathbf{0}} \int d^D x \psi_{\mathbf{0}}^*(\mathbf{x}) \psi_{\mathbf{0}}(\mathbf{x}) + \frac{1}{\beta} \text{Tr} \ln G^{-1}. \quad (4.193)$$

Aufgrund der Bedingung (4.190) trägt das Kondensat zwar nicht zur großkanonischen freien Energie bei. Wir haben aber dennoch den Kondensat-Beitrag in (4.193) explizit berücksichtigt, weil er zur Teilchenzahl (1.37) beiträgt. Dies wollen wir im folgenden im Rahmen der semiklassischen Näherung näher untersuchen.

Nach (1.32), (4.109) und (4.160) ist die semiklassische Näherung des Tracelog gegeben durch

$$\text{Tr} \ln G^{-1} = \int d^D x \int \frac{d^D p}{(2\pi\hbar)^D} \ln \left\{ 1 - e^{-\beta[H(\mathbf{x}, \mathbf{p}) - \mu]} \right\}. \quad (4.194)$$

Dabei beruht dieses Ergebnis auf der semiklassischen Näherung (4.159) der 1-Teilchen-Zustandsumme. Das bedeutet für die Zustandsdichte (2.220), daß alle Energien oberhalb des Potentialminimums beitragen. Aus quantenmechanischer Sicht ist dies aber unbefriedigend, da die tiefste

Energie die Grundzustandsenergie E_0 darstellt. Auf Seite 40f haben wir am Beispiele des anisotropen harmonischen Oszillators gesehen, daß man die semiklassische Näherung der 1-Teilchen-Zustandssumme so umentwickeln kann, daß alle Energien oberhalb der Grundzustandsenergie E_0 semiklassisch beschrieben werden. Hierzu ersetzt man

$$Z_1(\beta) = \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{D/2} \int d^D x e^{-\beta V(\mathbf{x})} \left\{ 1 + \mathcal{O}(\hbar^2) \right\} \quad (4.195)$$

durch

$$Z_1(\beta) = e^{-\beta E_0} \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{D/2} \int d^D x e^{-\beta V(\mathbf{x})} \left\{ 1 + \mathcal{O}(\hbar) \right\}, \quad (4.196)$$

wo der Beitrag der Grundzustandsenergie E_0 zur 1-Teilchen-Zustandssumme herausfaktorisiert wurde. Diese Umentwicklung der 1-Teilchen-Zustandssumme hat nun zur Folge, daß die semiklassische Näherung (4.194) des Tracelog modifiziert wird durch

$$\text{Tr} \ln G^{-1} = \int d^D x \int \frac{d^D p}{(2\pi\hbar)^D} \ln \left\{ 1 - e^{-\beta[H(\mathbf{x},\mathbf{p})+E_0-\mu]} \right\}. \quad (4.197)$$

Damit lautet die semiklassische Näherung der großkanonischen freien Energie (4.193):

$$\mathcal{F} = (E_0 - \mu) N_0 \int d^D x \psi_0^*(\mathbf{x}) \psi_0(\mathbf{x}) + \frac{1}{\beta} \int d^D x \int \frac{d^D p}{(2\pi\hbar)^D} \ln \left\{ 1 - e^{-\beta[H(\mathbf{x},\mathbf{p})+E_0-\mu]} \right\}. \quad (4.198)$$

Für die Teilchenzahl (1.37) erhalten wir dann (4.148), wobei die Teilchendichte gegeben ist durch

$$n(\mathbf{x}) = N_0 \psi_0^*(\mathbf{x}) \psi_0(\mathbf{x}) + \int \frac{d^D p}{(2\pi\hbar)^D} \frac{1}{e^{\beta[H(\mathbf{x},\mathbf{p})+E_0-\mu]} - 1}. \quad (4.199)$$

Demnach beschreibt der erste Term den Beitrag derjenigen Bosonen zur Teilchendichte, die in den Grundzustand kondensiert sind. Dieser Kondensat-Beitrag hängt offensichtlich von der Zahl N_0 der kondensierten Bosonen und der Grundzustandswellenfunktion $\psi_0(\mathbf{x})$ ab. Der zweite Term beschreibt den Beitrag der nichtkondensierten Bosonen zur Teilchendichte im Rahmen der semiklassischen Näherung. Da die Grundzustandswellenfunktion $\psi_0(\mathbf{x})$ der Normierungsbedingung genügt, geht die Teilchenzahl (4.148) mit (4.199) über in

$$N = N_0 + \int d^D x \int \frac{d^D p}{(2\pi\hbar)^D} \frac{1}{e^{\beta[H(\mathbf{x},\mathbf{p})+E_0-\mu]} - 1}. \quad (4.200)$$

In der Hochtemperaturphase (4.191) beschreibt (4.200) bei vorgegebener Teilchenzahl N die Temperaturabhängigkeit des chemischen Potentials μ . In der Tieftemperaturphase (4.192) dagegen definiert (4.200) die Temperaturabhängigkeit der Zahl N_0 der kondensierten Bosonen. Für beide Phasen läßt sich dann mit Hilfe von (4.199) die Temperaturabhängigkeit der Teilchendichte $n(\mathbf{x})$ bestimmen.

4.10 Freies Bose-Gas

Wir betrachten nun ein nichtwechselwirkendes Bose-Gas in drei Raumdimensionen in einem Kasten mit den Seitenlängen L (vgl. Abschnitt 3.6) im thermodynamischen Limes $L \rightarrow \infty$. Für dieses

homogene Bose-Gas gilt offensichtlich $V(\mathbf{x}) = 0$ und $E_0 = 0$, so daß sich die großkanonische freie Energie (4.198) mit der Hamilton-Funktion (2.9) und der Normierungsbedingung (4.187) reduziert auf

$$\mathcal{F} = -\mu N_0 + \frac{V}{\beta} \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \ln \left\{ 1 - e^{-\beta[\mathbf{p}^2/2M - \mu]} \right\}. \quad (4.201)$$

Mit Hilfe der Taylor-Reihe (3.84) des Logarithmus lassen sich die Impulsintegrale in (4.201) berechnen und wir erhalten

$$\mathcal{F} = -\mu N_0 - \frac{V}{\beta\lambda^3} \zeta_{5/2}(e^{\beta\mu}). \quad (4.202)$$

Hierbei bezeichnet λ die thermische de Broglie-Wellenlänge (2.11) und $\zeta_\nu(z)$ die polylogarithmische Funktion

$$\zeta_\nu(z) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n^\nu}. \quad (4.203)$$

Beachten wir die Identität

$$\frac{d}{dz} \zeta_\nu(z) = \frac{1}{z} \zeta_{\nu-1}(z), \quad (4.204)$$

so ergibt sich aus (4.202) die Teilchenzahl (1.37) zu

$$N = N_0 + \frac{V}{\lambda^3} \zeta_{3/2}(e^{\beta\mu}). \quad (4.205)$$

Wir berechnen zunächst die kritische Temperatur $T_c^{(0)}$, die die Hoch- von der Tieftemperaturphase trennt. Nach (4.191) und (4.192) folgt diese kritische Temperatur $T_c^{(0)}$ aus (4.205) mit den Bedingungen $N_0 = 0$ und $\mu = E_0 = 0$. Hierbei lautet die im Anhang abgeleitete Robinson-Formel (4.267) mit $\nu = 3/2$:

$$\zeta_{3/2}(e^{\beta\mu}) = -2\sqrt{-\pi\beta\mu} + \zeta(3/2) + \beta\mu\zeta(1/2) + \frac{1}{2}(\beta\mu)^2\zeta(-1/2) + \dots, \quad (4.206)$$

und wir lesen ab

$$\lim_{\mu \uparrow 0} \zeta_{3/2}(e^{\beta\mu}) = \zeta(3/2). \quad (4.207)$$

Damit erhalten wir am kritischen Punkt aus (4.205) die Bedingung

$$\lambda_c^{(0)} = \zeta^{1/3}(3/2) \left(\frac{V}{N} \right)^{1/3} \approx 1.377 \left(\frac{V}{N} \right)^{1/3}. \quad (4.208)$$

Sie besagt, daß die Kondensation eintritt, wenn die thermische de Broglie-Wellenlänge von der Größenordnung des mittleren Teilchenabstandes ist. Mit Hilfe von (2.11) ergibt sich die kritische Temperatur $T_c^{(0)}$ des freien Bose-Gases in drei Raumdimensionen zu (3.116). Demnach ist die kritische Temperatur um so größer, je größer die Teilchendichte N/V und je kleiner die Masse M der Bosonen ist.

Wir diskutieren nun die thermodynamischen Eigenschaften der Hochtemperaturphase $T > T_c^{(0)}$, die nach (4.191) durch die Bedingung $N_0 = 0$ charakterisiert ist. Die großkanonische freie Energie (4.202) reduziert sich auf

$$\mathcal{F} = -\frac{V}{\beta\lambda^3} \zeta_{5/2}(e^{\beta\mu}), \quad (4.209)$$

und die Teilchenzahl (4.205) lautet

$$N = \frac{V}{\lambda^3} \zeta_{3/2}(e^{\beta\mu}). \quad (4.210)$$

Bei vorgegebener Teilchenzahl N stellt (4.210) eine implizite Gleichung für die Temperaturabhängigkeit des chemischen Potentials μ dar. Außerdem ergibt sich aus (4.209) die Entropie (1.35) zu

$$S = \left\{ \frac{5V}{2\lambda^3} \zeta_{5/2}(e^{\beta\mu}) - \frac{\beta\mu V}{\lambda^3} \zeta_{3/2}(e^{\beta\mu}) \right\} k_B, \quad (4.211)$$

so daß die innere Energie (1.30) lautet

$$U = \frac{3V}{2\beta\lambda^3} \zeta_{5/2}(e^{\beta\mu}). \quad (4.212)$$

Wir berechnen nun die Wärmekapazität

$$C = \left. \frac{\partial U}{\partial T} \right|_{N,V}, \quad (4.213)$$

wo die innere Energie U für konstante Teilchenzahl N nach der Temperatur T differenziert werden muß. Hierzu setzen wir (4.210) in (4.212) ein

$$U = \frac{3\zeta_{5/2}(e^{\beta\mu})}{2\zeta_{3/2}(e^{\beta\mu})} k_B T N, \quad (4.214)$$

und erhalten für die Wärmekapazität (4.213) zunächst

$$C = \left\{ \frac{\zeta_{5/2}(e^{\beta\mu})}{\zeta_{3/2}(e^{\beta\mu})} + \left[1 - \frac{\zeta_{5/2}(e^{\beta\mu}) \zeta_{1/2}(e^{\beta\mu})}{\zeta_{3/2}^2(e^{\beta\mu})} \right] T e^{-\beta\mu} \left. \frac{\partial e^{\beta\mu}}{\partial T} \right|_{N,V} \right\} \frac{3}{2} k_B N. \quad (4.215)$$

Die dabei auftretende innere Ableitung bestimmen wir durch Differentiation von (4.210):

$$T e^{-\beta\mu} \left. \frac{\partial e^{\beta\mu}}{\partial T} \right|_{N,V} = -\frac{3\zeta_{3/2}(e^{\beta\mu})}{2\zeta_{1/2}(e^{\beta\mu})}. \quad (4.216)$$

Damit ergibt sich schließlich die Wärmekapazität (4.215) zu

$$C = \left\{ \frac{15\zeta_{5/2}(e^{\beta\mu})}{4\zeta_{3/2}(e^{\beta\mu})} - \frac{9\zeta_{3/2}(e^{\beta\mu})}{4\zeta_{1/2}(e^{\beta\mu})} \right\} k_B N. \quad (4.217)$$

Entsprechend erhalten wir für die Steigung der Wärmekapazität

$$\left. \frac{\partial C}{\partial T} \right|_{N,V} = \left\{ \frac{45\zeta_{5/2}(e^{\beta\mu})}{8\zeta_{3/2}(e^{\beta\mu})} - \frac{9\zeta_{3/2}(e^{\beta\mu})}{4\zeta_{1/2}(e^{\beta\mu})} - \frac{27\zeta_{3/2}^2(e^{\beta\mu}) \zeta_{-1/2}(e^{\beta\mu})}{8\zeta_{1/2}^3(e^{\beta\mu})} \right\} \frac{k_B N}{T}. \quad (4.218)$$

Wir wollen nun (4.217) und (4.218) am kritischen Punkt auswerten. Hierzu haben wir den Limes $\mu \uparrow 0$ durchzuführen. Aus der im Anhang abgeleiteten Robinson-Formel (4.267) folgen die Limes

$$\lim_{\mu \uparrow 0} \frac{\zeta_{5/2}(e^{\beta\mu})}{\zeta_{3/2}(e^{\beta\mu})} = \frac{\zeta(5/2)}{\zeta(3/2)}, \quad \lim_{\mu \uparrow 0} \frac{\zeta_{3/2}(e^{\beta\mu})}{\zeta_{1/2}(e^{\beta\mu})} = 0, \quad \lim_{\mu \uparrow 0} \frac{\zeta_{3/2}^2(e^{\beta\mu}) \zeta_{-1/2}(e^{\beta\mu})}{\zeta_{1/2}^2(e^{\beta\mu})} = \frac{\zeta^2(3/2)}{2\pi}. \quad (4.219)$$

Demnach lautet die Wärmekapazität am kritischen Punkt

$$\lim_{T \downarrow T_c^{(0)}} C = \frac{15\zeta(5/2)}{4\zeta(3/2)} k_B N \quad (4.220)$$

Entsprechend ist deren Steigung am kritischen Punkt durch

$$\lim_{T \downarrow T_c^{(0)}} \left. \frac{\partial C}{\partial T} \right|_{N,V} = \left\{ \frac{45\zeta(5/2)}{8\zeta(3/2)} - \frac{27\zeta^2(3/2)}{16\pi} \right\} \frac{k_B N}{T_c^{(0)}} \quad (4.221)$$

gegeben.

Nun diskutieren wir die thermodynamischen Eigenschaften unterhalb der kritischen Temperatur $T_c^{(0)}$. Da die Tieftemperaturphase nach (4.192) durch $\mu = E_0 = 0$ charakterisiert ist, reduziert sich die Teilchenzahl (4.205) mit (4.207) auf

$$N = N_0 + \frac{V}{\lambda^3} \zeta(3/2). \quad (4.222)$$

Unter Beachtung der thermischen Wellenlänge (2.11) und der kritischen Temperatur (3.116) folgt aus (4.222) die Temperaturabhängigkeit der Zahl N_0 der kondensierten Bosonen zu

$$N_0 = N \left\{ 1 - \left(\frac{T}{T_c^{(0)}} \right)^{3/2} \right\}. \quad (4.223)$$

Dies bedeutet, daß am absoluten Nullpunkt $T = 0$ alle Bosonen im Grundzustand kondensiert sind, während am kritischen Punkt $T = T_c^{(0)}$ keine makroskopische Besetzung des Grundzustandes vorliegt.

Außerdem sehen wir anhand von (4.202), daß in der Tieftemperaturphase $T < T_c^{(0)}$ wegen $\mu = E_0 = 0$ die in den Grundzustand kondensierten Bosonen nicht zur großkanonischen freien Energie beitragen. Die innere Energie in der Tieftemperaturphase läßt sich deshalb aus (4.212) ablesen, wenn man unter Beachtung der Robinson-Formel (4.267) auf $\mu = E_0 = 0$ spezialisiert. Mit Hilfe der thermischen Wellenlänge (2.11) und der kritischen Temperatur (3.116) erhalten wir dann

$$U = \frac{3\zeta(5/2)}{2\zeta(3/2)} k_B T_c^{(0)} N \left(\frac{T}{T_c^{(0)}} \right)^{5/2}, \quad (4.224)$$

so daß sich für die Wärmekapazität (4.213) ergibt

$$C = \frac{15\zeta(5/2)}{4\zeta(3/2)} k_B N \left(\frac{T}{T_c^{(0)}} \right)^{3/2}. \quad (4.225)$$

Einerseits erfüllt (4.225) den dritten Hauptsatz der Thermodynamik, wonach die Wärmekapazität am absoluten Nullpunkt verschwindet [17]:

$$\lim_{T \downarrow 0} C = 0. \quad (4.226)$$

Andererseits ergibt sich bei Annäherung an den kritischen Punkt

$$\lim_{T \uparrow T_c^{(0)}} C = \frac{15\zeta(5/2)}{4\zeta(3/2)} k_B N, \quad (4.227)$$

was mit (4.220) übereinstimmt. Demnach ist die Wärmekapazität des freien Bose-Gases am kritischen Punkt stetig:

$$\lim_{T \downarrow T_c^{(0)}} C = \lim_{T \uparrow T_c^{(0)}} C \approx 1.92567 k_B N. \quad (4.228)$$

Diese kritische Wärmekapazität ist größer als das Dulong-Petit-Gesetz (3.120), das sich im Hochtemperaturlimes mit $\zeta_\nu(e^{\beta\mu}) \approx e^{\beta\mu} \ll 1$ aus (4.217) ergibt. Unterhalb von $T_c^{(0)}$ erhalten wir aber aus (4.225) für die Steigung der Wärmekapazität

$$\lim_{T \uparrow T_c^{(0)}} \left. \frac{\partial C}{\partial T} \right|_{N,V} = \frac{45\zeta(5/2)}{8\zeta(3/2)} \frac{k_B N}{T_c^{(0)}}, \quad (4.229)$$

so daß am kritischen Punkt ein Sprung in der ersten Ableitung auftritt [15]:

$$\lim_{T \uparrow T_c^{(0)}} \left. \frac{\partial C}{\partial T} \right|_{N,V} - \lim_{T \downarrow T_c^{(0)}} \left. \frac{\partial C}{\partial T} \right|_{N,V} = \frac{27\zeta^2(3/2)}{16\pi} \frac{k_B N}{T_c^{(0)}} \approx 3.66577 \frac{k_B N}{T_c^{(0)}}. \quad (4.230)$$

Nach der Ehrenfestschen Klassifikation von Phasenübergängen [10] handelt es sich demnach beim homogenen, nichtwechselwirkenden Bose-Gas um einen Phasenübergang dritter Ordnung. Der resultierende Verlauf für die Temperaturabhängigkeit der Wärmekapazität ist in Abbildung 3.3 dargestellt.

Wir untersuchen zum Schluß, ob sich der Phasenübergang vom flüssigen zum suprafluiden ^4He nicht als Kondensation eines homogenen wechselwirkenden Bose-Gases verstehen läßt. Für flüssiges Helium der Dichte $\rho \approx 145 \text{ kg/m}^3$ und der atomaren Masse $M \approx 4 \cdot 1.67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$ ergibt sich die Teilchendichte

$$\frac{N}{V} = \frac{\rho}{M} \approx 2.16 \cdot 10^{28} \frac{1}{\text{m}^3} \quad (4.231)$$

und damit lautet die kritische Temperatur (3.116):

$$T_c^{(0)} \approx 3.06 \text{ K}. \quad (4.232)$$

Vergleicht man dies mit der experimentell bestimmten kritischen Temperatur $T_c^{(\text{exp})} \approx 2.18 \text{ K}$, so sieht man, daß der theoretisch berechnete Wert (4.232) zu groß ist. Ein weiterer wichtiger Unterschied ist, daß die Wärmekapazität von flüssigem Helium am kritischen Punkt divergiert (" λ -Übergang"), während die des homogenen nichtwechselwirkenden Bose-Gases nach (4.228) endlich bleibt. Aufgrund dieser beiden Unterschiede läßt sich der Phasenübergang vom flüssigen zum suprafluiden Helium nicht als Kondensation eines freien Bose-Gases auffassen. Bei Helium sind offensichtlich die Wechselwirkungen zwischen den Bosonen relevant.

4.11 Bose-Gas in Harmonischer Falle

Für die Erzeugung von Bose-Einstein-Kondensaten im Labor wurde eine Vielzahl verschiedener Magnetfallen entwickelt. Darin werden Atomgase, die schon auf tiefe Temperaturen vorgekühlt sind, festgehalten und weiter abgekühlt. Allgemein läßt sich sagen, daß bei den existierenden Fallenkonfigurationen inhomogene statische Magnetfelder verwendet werden und daß die Atome damit in einem lokalen Feldminimum festgehalten werden. Daher entspricht das Fallenpotential in guter Näherung dem eines anisotropen harmonischen Oszillators (2.213) in $D = 3$ Raumdimensionen. Die dabei verwendeten Fallenfrequenzen $f_i = \omega_i/2\pi$ mit $i = 1, 2, 3$ sind von der Größenordnung $\bar{f} = 100$ Hz, so daß die Abstände zwischen den Energieniveaus $\hbar\bar{f}$ für typische Temperaturen in der Umgebung des kritischen Punktes von $T = 100$ nK klein gegenüber der thermischen Energie $k_B T$ sind:

$$\frac{\hbar\bar{f}}{k_B T} \approx 0.048 \ll 1. \quad (4.233)$$

Es ist demnach näherungsweise gerechtfertigt, den Einfluß des Fallenpotentials (2.213) in der Umgebung des kritischen Punktes semiklassisch zu untersuchen. Im folgenden wollen wir im einzelnen diskutieren, wie groß die Quantenkorrekturen zur führenden semiklassischen Näherung sind.

Ausgangspunkt unserer Überlegungen ist die semiklassische Näherung zur 1-Teilchen-Zustandsumme, wie sie schon in (2.229) und (2.232) vorbereitet wurde:

$$Z_1(\beta) = e^{-\beta E_0} \frac{1}{(\hbar\beta\tilde{\omega})^3} \left\{ 1 + \frac{3}{2} \hbar\beta\bar{\omega} + \mathcal{O}(\hbar^2) \right\}. \quad (4.234)$$

Hierbei bezeichnet $\tilde{\omega} = (\omega_1\omega_2\omega_3)^{1/3}$ bzw. $\bar{\omega} = (\omega_1 + \omega_2 + \omega_3)/3$ das geometrische bzw. arithmetische Mittel der Fallenkreisfrequenzen $\omega_1, \omega_2, \omega_3$. Außerdem ist die Grundzustandsenergie durch $E_0 = 3\hbar\bar{\omega}/2$ gegeben. Nach (2.9), (2.213), (4.187), (4.198) und (4.203) erhalten wir für die großkanonische freie Energie:

$$\mathcal{F} = (E_0 - \mu)N_0 - \frac{1}{\beta(\hbar\beta\tilde{\omega})^3} \left\{ \zeta_4(e^{\beta(\mu-E_0)}) + \frac{3}{2} \hbar\beta\bar{\omega} \zeta_3(e^{\beta(\mu-E_0)}) \right\}, \quad (4.235)$$

und die Teilchenzahl (1.37) lautet:

$$N = N_0 + \frac{1}{(\hbar\beta\tilde{\omega})^3} \left\{ \zeta_3(e^{\beta(\mu-E_0)}) + \frac{3}{2} \hbar\beta\bar{\omega} \zeta_2(e^{\beta(\mu-E_0)}) \right\}. \quad (4.236)$$

Hierbei beschreibt jeweils die erste polylogarithmische Funktion die führende semiklassische Näherung, während die zweite polylogarithmische Funktion die Quantenkorrekturen darstellt, die um den Faktor (4.233) unterdrückt sind.

Wir berechnen wieder zunächst die kritische Temperatur T_c , die nach (4.191), (4.192) durch die Bedingungen $N_0 = 0$ und $\mu = E_0$ charakterisiert ist. Damit folgt aus (4.236) und (4.298) zunächst

$$N = \left(\frac{k_B T_c}{\hbar\tilde{\omega}} \right)^3 \left\{ \zeta(3) + \frac{3\zeta(2)\hbar\bar{\omega}}{2k_B T_c} \right\}, \quad (4.237)$$

woraus sich die kritische Temperatur

$$T_c = \frac{\hbar\tilde{\omega}}{k_B} \left[\frac{N}{\zeta(3)} \right]^{1/3} \left\{ 1 - \frac{\zeta(2)\bar{\omega}}{2\zeta^{2/3}(3)\tilde{\omega}N^{1/3}} \right\} \quad (4.238)$$

berechnen läßt. Der führende Beitrag in (4.238) ist von der Form

$$T_c^{(0)} = \frac{\hbar\tilde{\omega}}{k_B} \left[\frac{N}{\zeta(3)} \right]^{1/3} \approx 4.5 \left(\frac{\tilde{f}}{100 \text{ Hz}} \right) N^{1/3} \text{ nK}. \quad (4.239)$$

Die Korrektur in (4.238) lautet

$$\frac{\Delta T_c}{T_c^{(0)}} = -\frac{\zeta(2)\bar{\omega}}{2\zeta^{2/3}(3)\tilde{\omega}N^{1/3}} \approx -0.7275 \frac{\bar{\omega}}{\tilde{\omega}N^{1/3}}, \quad (4.240)$$

d.h. sie führt zu einer Absenkung der kritischen Temperatur, die um so kleiner ist, je größer die Teilchenzahl N ist. Damit stellt (4.240) eine Finite-Size-Korrektur dar, obwohl sie ursprünglich aus der Quantenkorrektur der semiklassischen Näherung hervorgegangen ist. Diese physikalische Uminterpretation der Näherung ist darauf zurückzuführen, daß der Kleinheitsparameter (4.233) am kritischen Punkt aufgrund von (4.239) proportional zu $N^{-1/3}$ ist und daher mit zunehmender Teilchenzahl N immer kleiner wird. Außerdem beobachten wir, daß die Korrektur (4.240) bei einer isotropen Falle unabhängig von der Fallenfrequenz ist.

In einem 1996 durchgeführten Experiment wurde die Bose-Einstein-Kondensation von ^{87}Rb -Atomen untersucht [18]. Hierbei wurde eine anisotrope harmonische Falle (2.213) mit den Frequenzen $f_1 = f_2$, $f_3 = \sqrt{8} f_1 = 373 \text{ Hz}$ verwendet. Wir erhalten demnach für das geometrische und das arithmetische Mittel der Fallenfrequenzen

$$\tilde{f} = \frac{f_3}{8^{1/3}}, \quad \bar{f} = \frac{\sqrt{8} + 4}{12} f_3. \quad (4.241)$$

Bei einer Zahl von $N = 40\,000$ festgehaltenen Atomen führt (4.239) auf die kritische Temperatur

$$T_c^{(0)} = 287 \text{ nK}. \quad (4.242)$$

Experimentell wurde dagegen die kritische Temperatur $T_c^{(\text{exp})} = 0.94(5) T_c^{(0)}$ gemessen. Ein Teil dieser Abweichung ist auf die Finite-Size-Korrektur (4.240) zurückzuführen:

$$\frac{\Delta T_c}{T_c^{(0)}} \approx 2.4 \%. \quad (4.243)$$

Die dann noch verbleibende Diskrepanz zur experimentell bestimmten kritischen Temperatur von etwa 3.1 % läßt sich dadurch erklären, daß wir bisher den Einfluß der 2-Teilchen-Wechselwirkung vernachlässigt haben. Demnach können wir festhalten, daß es sich im Experiment [18] um ein schwach wechselwirkendes ^{87}Rb -Gas handeln muß.

Nun diskutieren wir die Hochtemperaturphase, in der das Kondensat gemäß (4.191) verschwindet: $N_0 = 0$. Damit sind großkanonische freie Energie (4.235) und Teilchenzahl (4.236) gegeben durch

$$\mathcal{F} = -\frac{1}{\beta(\hbar\beta\tilde{\omega})^3} \left\{ \zeta_4(e^{\beta(\mu-E_0)}) + \frac{3}{2} \hbar\beta\tilde{\omega} \zeta_3(e^{\beta(\mu-E_0)}) \right\}, \quad (4.244)$$

$$N = \frac{1}{(\hbar\beta\tilde{\omega})^3} \left\{ \zeta_3(e^{\beta(\mu-E_0)}) + \frac{3}{2} \hbar\beta\tilde{\omega} \zeta_2(e^{\beta(\mu-E_0)}) \right\}. \quad (4.245)$$

Für die Entropie (1.35) erhalten wir

$$S = \frac{k_B}{(\hbar\beta\tilde{\omega})^3} \left\{ 4\zeta_4(e^{\beta(\mu-E_0)}) + \left[6\hbar\beta\tilde{\omega} - \beta\mu \right] \zeta_3(e^{\beta(\mu-E_0)}) - \frac{3}{2} \hbar\beta^2\tilde{\omega}\mu\zeta_2(e^{\beta(\mu-E_0)}) \right\}. \quad (4.246)$$

Hierbei haben wir $E_0 = 3\hbar\tilde{\omega}/2$ verwendet und einen Term proportional zu $\hbar\beta\tilde{\omega}E_0 \sim \mathcal{O}(\hbar^2)$ vernachlässigt, da er erst in der nächst höheren Ordnung der semiklassischen Entwicklung relevant ist. Entsprechend lautet die innere Energie (1.30):

$$U = \frac{1}{\beta(\hbar\beta\tilde{\omega})^3} \left\{ 3\zeta_4(e^{\beta(\mu-E_0)}) + \frac{9}{2} \hbar\beta\tilde{\omega} \zeta_3(e^{\beta(\mu-E_0)}) \right\}. \quad (4.247)$$

Einsetzen von (4.245) in (4.247) führt auf

$$U = \left\{ \frac{3\zeta_4(e^{\beta(\mu-E_0)})}{\zeta_3(e^{\beta(\mu-E_0)})} + \frac{9}{2} \hbar\beta\tilde{\omega} \left[1 - \frac{\zeta_4(e^{\beta(\mu-E_0)}) \zeta_2(e^{\beta(\mu-E_0)})}{\zeta_3^2(e^{\beta(\mu-E_0)})} \right] \right\} k_B T N. \quad (4.248)$$

Die Wärmekapazität (4.213) ergibt sich zunächst zu

$$C = k_B N \left\{ \frac{3\zeta_4(e^{\beta(\mu-E_0)})}{\zeta_3(e^{\beta(\mu-E_0)})} + T e^{-\beta(\mu-E_0)} \frac{\partial e^{\beta(\mu-E_0)}}{\partial T} \Big|_{N,V} \left[3 \left(1 - \frac{\zeta_4(e^{\beta(\mu-E_0)}) \zeta_2(e^{\beta(\mu-E_0)})}{\zeta_3^2(e^{\beta(\mu-E_0)})} \right) - \frac{9}{2} \hbar\beta\tilde{\omega} \left(\frac{\zeta_2(e^{\beta(\mu-E_0)})}{\zeta_3(e^{\beta(\mu-E_0)})} + \frac{\zeta_4(e^{\beta(\mu-E_0)}) \zeta_1(e^{\beta(\mu-E_0)})}{\zeta_3^2(e^{\beta(\mu-E_0)})} - 2 \frac{\zeta_4(e^{\beta(\mu-E_0)}) \zeta_2^2(e^{\beta(\mu-E_0)})}{\zeta_3^3(e^{\beta(\mu-E_0)})} \right) \right] \right\}. \quad (4.249)$$

Die dabei auftretende innere Ableitung bestimmen wir durch Differentiation von (4.245):

$$-\frac{T}{3} e^{-\beta(\mu-E_0)} \frac{\partial e^{\beta(\mu-E_0)}}{\partial T} \Big|_{N,V} = \frac{\zeta_3(e^{\beta(\mu-E_0)})}{\zeta_2(e^{\beta(\mu-E_0)})} + \hbar\beta\tilde{\omega} \left[1 - \frac{3\zeta_3(e^{\beta(\mu-E_0)}) \zeta_1(e^{\beta(\mu-E_0)})}{2\zeta_2^2(e^{\beta(\mu-E_0)})} \right]. \quad (4.250)$$

Damit ergibt sich die Wärmekapazität (4.249) zu

$$C = k_B N \left\{ 12 \frac{\zeta_4(e^{\beta(\mu-E_0)})}{\zeta_3(e^{\beta(\mu-E_0)})} - 9 \frac{\zeta_3(e^{\beta(\mu-E_0)})}{\zeta_2(e^{\beta(\mu-E_0)})} - \frac{27}{2} \hbar\beta\tilde{\omega} \left[\frac{\zeta_4(e^{\beta(\mu-E_0)}) \zeta_2(e^{\beta(\mu-E_0)})}{\zeta_3^2(e^{\beta(\mu-E_0)})} + \frac{\zeta_3(e^{\beta(\mu-E_0)}) \zeta_1(e^{\beta(\mu-E_0)})}{\zeta_2^2(e^{\beta(\mu-E_0)})} \right] \right\}. \quad (4.251)$$

Im Hochtemperaturlimes $\zeta_\nu(e^{\beta(\mu-E_0)}) \approx e^{\beta(\mu-E_0)} \ll 1$ geht (4.251) in das Dulong-Petit-Gesetz des dreidimensionalen harmonischen Oszillators über:

$$\lim_{T \rightarrow \infty} C = 3k_B N. \quad (4.252)$$

Am kritischen Punkt erhalten wir in führender semiklassischer Ordnung mit $\mu = E_0$ und (4.298):

$$\lim_{T \downarrow T_c} C^{(0)} = k_B N \left\{ \frac{12\zeta(4)}{\zeta(3)} - \frac{9\zeta(3)}{\zeta(2)} \right\} \approx 4.22785 k_B N. \quad (4.253)$$

Durch die Quantenkorrekturen in (4.251) entsteht aber am kritischen Punkt wegen (4.298) eine Divergenz:

$$\lim_{T \downarrow T_c} C^{(1)} = \infty. \quad (4.254)$$

Die Tieftemperaturphase ist nach (4.192) durch die Bedingung $\mu = E_0$ charakterisiert. Aufgrund von (4.298) reduziert sich dann die Teilchenzahl (4.236) auf

$$N = N_0 + \frac{1}{(\hbar\beta\bar{\omega})^3} \left\{ \zeta(3) + \frac{3}{2} \zeta(2) \hbar\beta\bar{\omega} \right\}. \quad (4.255)$$

Unter Beachtung der kritischen Temperatur (4.238) folgt aus (4.255) die Temperaturabhängigkeit der Zahl $= N_0$ der kondensierten Bosonen zu

$$N_0 = N \left\{ 1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^3 - \frac{3\zeta(2)\bar{\omega}}{2\zeta^{2/3}(3)\bar{\omega}N^{1/3}} \left[\left(\frac{T}{T_c} \right)^2 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^3 \right] \right\}. \quad (4.256)$$

Auch hier wieder können wir beobachten, daß am absoluten Nullpunkt $T = 0$ alle Bosonen im Grundzustand kondensiert sind, während am kritischen Punkt $T = T_c$ keine makroskopische Besetzung des Grundzustandes vorliegt. In Abbildung 4.3 ist der Bruchteil N/N_0 der kondensierten Atome als Funktion der reduzierten Temperatur $T/T_c^{(0)}$ dargestellt. Wir beobachten, daß die experimentellen Meßpunkte tendenziell unterhalb der semiklassischen Kurve (4.256) liegen. Diese Abweichung läßt sich damit begründen, daß der Einfluß der 2-Teilchen-Wechselwirkung bisher nicht berücksichtigt ist.

Ferner lesen wir aus (4.235) ab, daß die im Grundzustand kondensierten Bosonen nicht zur großkanonischen freien Energie beitragen. Daher können wir die innere Energie in der Tieftemperaturphase unmittelbar aus (4.247) ablesen, wenn wir die Bedingung $\mu = E_0$ unter Verwendung von (4.298) einarbeiten und die kritische Temperatur (4.238) beachten:

$$U = k_B T_c N \left\{ \frac{3\zeta(4)}{\zeta(3)} \left(\frac{T}{T_c} \right)^4 + \frac{9\bar{\omega}\zeta^{1/3}(3)}{2\bar{\omega}N^{1/3}} \left[\left(\frac{T}{T_c} \right)^3 - \frac{\zeta(2)\zeta(4)}{\zeta^2(3)} \left(\frac{T}{T_c} \right)^4 \right] \right\}. \quad (4.257)$$

Damit ergibt sich die Wärmekapazität (4.213) in der Tieftemperaturphase zu

$$C = k_B N \left\{ \frac{12\zeta(4)}{\zeta(3)} \left(\frac{T}{T_c} \right)^3 + \frac{27\bar{\omega}\zeta^{1/3}(3)}{2\bar{\omega}N^{1/3}} \left[\left(\frac{T}{T_c} \right)^2 - \frac{4\zeta(2)\zeta(4)}{3\zeta^2(3)} \left(\frac{T}{T_c} \right)^3 \right] \right\}. \quad (4.258)$$

Am absoluten Nullpunkt erfüllt (4.258) den dritten Hauptsatz der Thermodynamik (4.226), am kritischen Punkt erhalten wir dagegen

$$\lim_{T \uparrow T_c} C = k_B N \left\{ \frac{12\zeta(4)}{\zeta(3)} + \frac{27\bar{\omega}\zeta^{1/3}(3)}{2\bar{\omega}N^{1/3}} \left[1 - \frac{4\zeta(2)\zeta(4)}{3\zeta^2(3)} \right] \right\}. \quad (4.259)$$

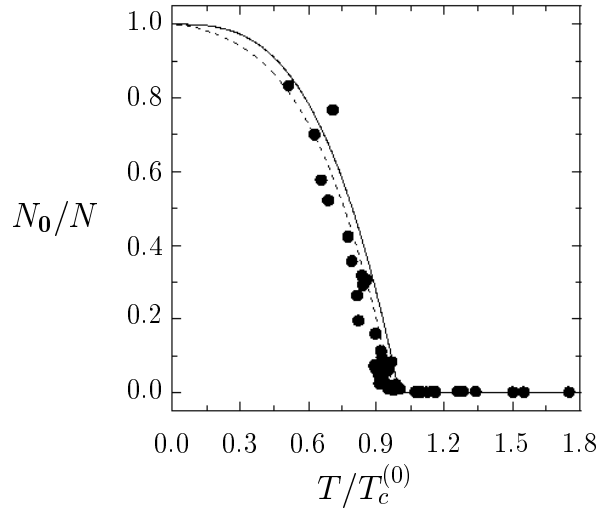


Abbildung 4.3: Bruchteil N_0/N der kondensierten Atome als Funktion der reduzierten Temperatur $T/T_c^{(0)}$ [18]. Experimentelle Werte (Punkte), semiklassische Kurve (4.256) ohne (durchgezogene Linie) und mit (gestrichelte Linie) Finite-Size-Korrekturen.

Dieses Ergebnis ist von der Form

$$\lim_{T \uparrow T_c} C \approx k_B N \left\{ 10.8047 - 8.67828 \frac{\bar{\omega}}{\bar{\omega} N^{1/3}} \right\}, \quad (4.260)$$

so daß wir als Wärmekapazität in führender Ordnung

$$\lim_{T \uparrow T_c} C^{(0)} \approx 10.8047 k_B N \quad (4.261)$$

erhalten. Für das oben geschilderte Experiment mit ^{87}Rb -Atomen [18] reduzieren die Finite-Size-Korrekturen in (4.259) die Wärmekapazität (4.261) auf

$$\lim_{T \uparrow T_c} C^{(1)} \approx 10.5159 k_B N. \quad (4.262)$$

Der Vergleich von (4.253), (4.254) mit (4.261), (4.262) zeigt, daß die Wärmekapazität am kritischen Punkt unstetig ist. Die Temperaturabhängigkeit der Wärmekapazität, wie sie durch (4.245), (4.251) oberhalb bzw. (4.258) unterhalb des kritischen Punktes beschrieben wird, ist in Abbildung 4.4 dargestellt. Da die im Grundzustand kondensierten Bosonen nicht die thermischen Eigenschaften beeinflussen, wird die Temperaturabhängigkeit der Entropie für alle Temperaturen durch (4.246) bestimmt. Demnach ist die Entropie am kritischen Punkt stetig:

$$\lim_{T \uparrow T_c} S = \lim_{T \downarrow T_c} S. \quad (4.263)$$

Nach der Ehrenfestschen Klassifikation der Phasenübergänge handelt es sich bei der Bose-Einstein-Kondensation in einer harmonischen Falle um einen Phasenübergang zweiter Ordnung.

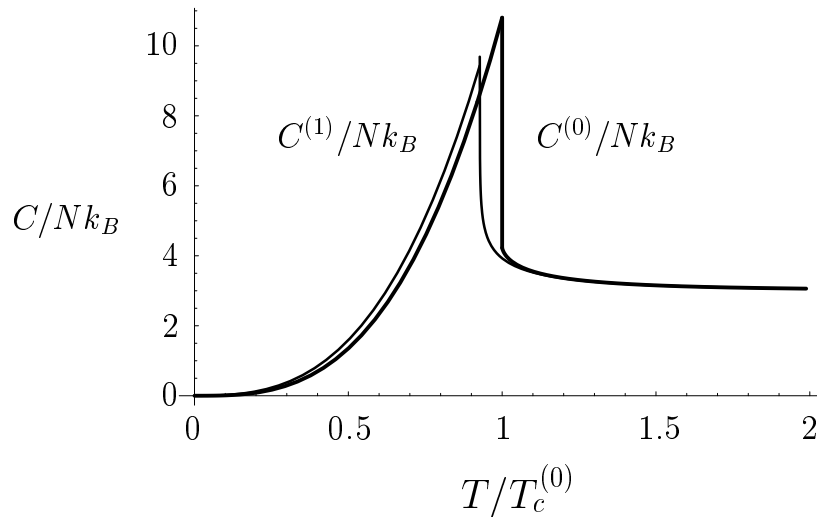


Abbildung 4.4: Temperaturabhängigkeit der Wärmekapazität des Bose-Gases in einer isotropen harmonischen Falle in führender semiklassischer Ordnung $C^{(0)}$ und mit Finite-Size-Korrekturen $C^{(1)}$ für $N = 1000$ Teilchen.

4.12 Anhang: Robinson-Formel

In diesem Abschnitt untersuchen wir das Verhalten der polylogarithmischen Funktion (4.203) mit der Fugazität $z = e^{\beta\mu}$:

$$\zeta_\nu(e^{\beta\mu}) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{e^{\beta\mu m}}{m^\nu}. \quad (4.264)$$

Insbesondere sind wir daran interessiert, das Verhalten von (4.264) für negatives chemisches Potential μ im Grenzübergang $\mu \uparrow 0$ zu bestimmen. In einer naiven Rechnung würde man die Exponentialfunktion in eine Taylor-Reihe entwickeln

$$\zeta_\nu(e^{\beta\mu}) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m^\nu} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\beta\mu m)^k}{k!}, \quad (4.265)$$

so daß eine Vertauschung der beiden Summationen auf das Ergebnis

$$\zeta_\nu(e^{\beta\mu}) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\beta\mu)^k}{k!} \zeta(\nu - k) \quad (4.266)$$

führt. Hierbei bezeichnet $\zeta(\nu)$ die Riemannsche Zeta-Funktion (3.117). Eine genauere Analyse zeigt aber, daß man die beiden Summationen in (4.265) nur dann vertauschen kann, wenn man in (4.266) noch einen Korrekturterm berücksichtigt. Dies führt auf die Robinson-Formel [12]:

$$\zeta_\nu(e^{\beta\mu}) = \Gamma(1 - \nu) (-\beta\mu)^{\nu-1} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\beta\mu)^k}{k!} \zeta(\nu - k). \quad (4.267)$$

Der erste Term ist dabei insofern singulär, als das chemische Potential μ mit einer im allgemeinen nichtnatürlichen Potenz ν auftritt. Demgegenüber handelt es sich beim zweiten Term um einen

regulären Beitrag, da das chemische Potential μ mit natürlichen Potenzen $k = 0, 1, 2, \dots$ auftritt.

Wir leiten nun die Robinson-Formel (4.267) aus der Distributionenidentität (2.133) her. Hierzu multiplizieren wir (2.133) mit einer Funktion $f(x)$ und integrieren über das Intervall (η, ∞) im Limes $\eta \downarrow 0$. Es ergibt sich dadurch eine gegenüber (2.134) modifizierte Poissonsche Summenformel:

$$\sum_{m=1}^{\infty} f(m) = \int_0^{\infty} dx f(x) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{\infty} dx f(x) \cos 2\pi n x. \quad (4.268)$$

Wir werten dann (4.268) für die Funktion $f(x) = x^{-\nu} e^{\beta\mu x}$ aus. Dabei treten die beiden Integrale

$$\int_0^{\infty} dx x^{-\nu} e^{\beta\mu x} = \Gamma(1 - \nu) (-\beta\mu)^{\nu-1}, \quad (4.269)$$

$$\int_0^{\infty} dx x^{-\nu} e^{\beta\mu x} \cos 2\pi n x = \operatorname{Re} \left\{ \Gamma(1 - \nu) (-\beta\mu - 2\pi i n)^{\nu-1} \right\} \quad (4.270)$$

auf, so daß (4.268) übergeht in

$$\sum_{m=1}^{\infty} \frac{e^{\beta\mu m}}{m^{\nu}} = \Gamma(1 - \nu) (-\beta\mu)^{\nu-1} + 2 \Gamma(1 - \nu) \sum_{n=1}^{\infty} \operatorname{Re} \left\{ (-2\pi i n)^{\nu-1} \left(1 + \frac{\beta\mu}{2\pi i n} \right)^{\nu-1} \right\}. \quad (4.271)$$

Zunächst betrachten wir (4.271) im Grenzübergang $\mu \uparrow 0$ und erhalten

$$\sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m^{\nu}} = 2^{\nu} \pi^{\nu-1} \Gamma(1 - \nu) \sin \frac{\pi\nu}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^{1-\nu}}. \quad (4.272)$$

Dabei führt die Identität [13, (8.334.3)] der Gamma-Funktion [16]

$$\Gamma(x) \Gamma(1 - x) = \frac{\pi}{\sin \pi x} \quad (4.273)$$

dazu, daß sich (4.272) vereinfacht zu

$$\sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m^{\nu}} = \frac{2^{\nu-1} \pi^{\nu}}{\Gamma(\nu) \cos \pi\nu/2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^{1-\nu}}. \quad (4.274)$$

Demnach stellt (4.274) eine grundlegende Identität der Riemannschen Zeta-Funktion (3.117) dar [14]:

$$\zeta(1 - z) = \frac{2^{1-z} \Gamma(z) \cos \pi z/2}{\pi^z} \zeta(z). \quad (4.275)$$

Sie dient zur analytischen Fortsetzung der Riemannschen Zeta-Funktion. Beispielsweise kann man mit Hilfe von (4.275) den Funktionswert $\zeta(-1)$ auf den Funktionswert $\zeta(2) = \pi^2/6$ zurückführen und erhält dadurch die Aussage

$$\sum_{m=1}^{\infty} m = -\frac{1}{12}. \quad (4.276)$$

Nun kehren wir wieder zur Gleichung (4.271) zurück. Die linke Seite entspricht wegen (4.264) gerade $\zeta_\nu(e^{\beta\mu})$. Auf der rechten Seite führen wir eine Taylor-Reihe in Potenzen von $\beta\mu$ durch und beachten dabei die Riemannsche Zeta-Funktion (3.117):

$$\begin{aligned} \zeta_\nu(e^{\beta\mu}) &= \Gamma(1-\nu)(-\beta\mu)^{\nu-1} + 2\Gamma(1-\nu) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\nu)(2\pi)^{\nu-1-k}}{k! \Gamma(\nu-k)} \\ &\quad \times \cos\left[\frac{\pi}{2}(\nu-1+k)\right] (\beta\mu)^k \zeta(1-\nu+k). \end{aligned} \quad (4.277)$$

Wir verwenden nun die Identität (4.275) der Riemannschen Zeta-Funktion und die Identität (4.273) der Gamma-Funktion und erhalten

$$\zeta_\nu(e^{\beta\mu}) = \Gamma(1-\nu)(-\beta\mu)^{\nu-1} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2(\beta\mu)^k}{\sin(\pi\nu) k!} \cos\left[\frac{\pi}{2}(\nu-1+k)\right] \cos\left[\frac{\pi}{2}(\nu-k)\right] \zeta(\nu-k). \quad (4.278)$$

Mit dem trigonometrischen Additionstheorem

$$2 \cos \alpha \cos \beta = \cos(\alpha + \beta) + \cos(\alpha - \beta) \quad (4.279)$$

reduziert sich schließlich (4.278) auf die Robinson-Formel (4.267).

Bei der Anwendung der Robinson-Formel (4.267) muß beachtet werden, daß im Falle eines natürlichen Index ν sowohl die Gamma-Funktion als auch eine Riemannsche Zeta-Funktion singulär werden. Wir untersuchen deshalb (4.267) für $\nu = l + \eta$ mit $l = 1, 2, 3, 4, \dots$ im Limes $\eta \rightarrow 0$ und erhalten zunächst:

$$\zeta_l(e^{\beta\mu}) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \left\{ \Gamma(1-l-\eta) (-\beta\mu)^{l-1+\eta} + \frac{(\beta\mu)^{l-1}}{(l-1)!} \zeta(1+\eta) \right\} + \sum_{\substack{k=0 \\ k \neq l-1}}^{\infty} \frac{(\beta\mu)^k}{k!} \zeta(l-k). \quad (4.280)$$

Hierbei beachten wir die Taylor-Entwicklung

$$(-\beta\mu)^\eta = 1 + \eta \ln(-\beta\mu) + \mathcal{O}(\eta^2). \quad (4.281)$$

Die Gamma-Funktion $\Gamma(z)$ besitzt an den negativen ganzen Zahlen einfache Pole. Durch Iteration der Funktionenidentität

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z) \quad (4.282)$$

läßt sich das Verhalten der Gamma-Funktion in der Umgebung dieser einfachen Pole bestimmen. Für $l = 1, 2, 3, 4, \dots$ gilt

$$\Gamma(1-\eta) = (-\eta)(-1-\eta) \cdots (-l+1-\eta)\Gamma(-l+1-\eta) = 1 - \Gamma'(1)\eta + \mathcal{O}(\eta^2), \quad (4.283)$$

woraus unmittelbar folgt

$$\Gamma(1-l-\eta) = \frac{(-1)^{l-1}}{(l-1)!} \left\{ -\frac{1}{\eta} + \Gamma'(1) + \sum_{k=1}^{l-1} \frac{1}{k} + \mathcal{O}(\eta) \right\}. \quad (4.284)$$

Die Riemannsche Zeta-Funktion $\zeta(z)$ ist mit Ausnahme des Punktes $z = 1$ in der ganzen komplexen Ebene analytisch. Wir wollen nun das Verhalten von $\zeta(z)$ in der Umgebung von $z = 1$ untersuchen. Hierzu betrachten wir die Funktion

$$\zeta_1(e^{\beta\mu}) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{e^{\beta\mu m}}{m}, \quad (4.285)$$

die gemäß (3.84) die explizite Form

$$\zeta_1(e^{\beta\mu}) = -\ln(1 - e^{\beta\mu}) \quad (4.286)$$

besitzt und deshalb der Beziehung

$$\zeta_1(e^{\beta\mu}) \rightarrow -\ln(-\beta\mu), \quad \mu \uparrow 0 \quad (4.287)$$

genügt. Andererseits erhalten wir aus (4.280)

$$\zeta_1(e^{\beta\mu}) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \left\{ \Gamma(-\eta) (-\beta\mu)^\eta + \zeta(1 + \eta) \right\} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(\beta\mu)^k}{k!} \zeta(1 - k), \quad (4.288)$$

was sich mit Hilfe von (4.281) reduziert auf

$$\zeta_1(e^{\beta\mu}) = -\ln(-\beta\mu) + \lim_{\eta \rightarrow 0} \left\{ -\frac{1}{\eta} + \Gamma'(1) + \zeta(1 + \eta) \right\} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(\beta\mu)^k}{k!} \zeta(1 - k), \quad (4.289)$$

so daß der Limes

$$\zeta_1(e^{\beta\mu}) \rightarrow -\ln(-\beta\mu) + \lim_{\eta \rightarrow 0} \left\{ -\frac{1}{\eta} + \Gamma'(1) + \zeta(1 + \eta) \right\}, \quad \mu \uparrow 0 \quad (4.290)$$

folgt. Der Vergleich von (4.286) und (4.290) führt schließlich zur Identifikation

$$\zeta(1 + \eta) = \frac{1}{\eta} - \Gamma'(1) + \mathcal{O}(\eta). \quad (4.291)$$

Hieraus erhalten wir mit Hilfe der Identität der Riemannschen Zeta-Funktion (4.275) die Aussagen:

$$\sum_{m=1}^{\infty} 1 = -\frac{1}{2}, \quad \sum_{m=1}^{\infty} \ln m = \frac{1}{2} \ln 2\pi. \quad (4.292)$$

Verwenden wir nun (4.281), (4.284) und (4.291), so reduziert sich (4.280) auf

$$\zeta_l(e^{\beta\mu}) = \frac{(\beta\mu)^{l-1}}{(l-1)!} \left\{ \sum_{k=1}^{l-1} \frac{1}{k} - \ln(-\beta\mu) \right\} + \sum_{\substack{k=0 \\ k \neq l-1}}^{\infty} \frac{(\beta\mu)^k}{k!} \zeta(l - k). \quad (4.293)$$

Damit erhalten wir für $l = 1, 2, 3, 4$ die expliziten Entwicklungen

$$\zeta_1(e^{\beta\mu}) = -\ln(-\beta\mu) + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(\beta\mu)^k}{k!} \zeta(1 - k), \quad (4.294)$$

$$\zeta_2(e^{\beta\mu}) = \beta\mu \left\{ 1 - \ln(-\beta\mu) \right\} + \zeta(2) + \sum_{k=2}^{\infty} \frac{(\beta\mu)^k}{k!} \zeta(2 - k), \quad (4.295)$$

$$\zeta_3(e^{\beta\mu}) = \frac{1}{2} (\beta\mu)^2 \left\{ \frac{3}{2} - \ln(-\beta\mu) \right\} + \zeta(3) + \beta\mu \zeta(2) + \sum_{k=3}^{\infty} \frac{(\beta\mu)^k}{k!} \zeta(3 - k), \quad (4.296)$$

$$\zeta_4(e^{\beta\mu}) = \frac{1}{6} (\beta\mu)^3 \left\{ \frac{11}{6} - \ln(-\beta\mu) \right\} + \zeta(4) + \beta\mu \zeta(3) + \frac{(\beta\mu)^2}{2} \zeta(2) + \sum_{k=4}^{\infty} \frac{(\beta\mu)^k}{k!} \zeta(4 - k). \quad (4.297)$$

Hieraus und aus (4.267) lesen wir die folgenden Limites ab:

$$\lim_{\mu \uparrow 0} \zeta_{\nu}(e^{\beta\mu}) = \begin{cases} \infty & ; \nu \leq 1 \\ \zeta(\nu) & ; \nu > 1 \end{cases} . \quad (4.298)$$

Teil II

Schwach Wechselwirkende Quantengase

Kapitel 5

Streutheorie

5.1 Wechselwirkungspotentiale

Im folgenden werden wir diskutieren, welche 2-Teilchen-Wechselwirkungen in der Natur auftreten. Hierzu stellen wir fest, daß aufgrund eines Newtonschen Axioms die durch 2-Teilchen-Wechselwirkungen hervorgerufenen Kräfte betragsmäßig gleich groß und entgegengesetzt gerichtet sind. Das entsprechende Wechselwirkungspotential $V^{(\text{int})}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ muß daher von der Differenz der Koordinaten abhängen:

$$V^{(\text{int})}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = V^{(\text{int})}(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (5.1)$$

Deshalb besitzt das Wechselwirkungspotential die Fourier-Darstellung

$$V^{(\text{int})}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} V^{(\text{int})}(\mathbf{k}), \quad (5.2)$$

wobei sich die Fourier-Transformierte gemäß

$$V^{(\text{int})}(\mathbf{k}) = \int d^3x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} V^{(\text{int})}(\mathbf{x}) \quad (5.3)$$

berechnen läßt. Besitzt das Wechselwirkungspotential (5.1) eine Symmetrie, dann überträgt sich diese entsprechend auf die Fourier-Transformierte (5.3). Im Falle einer Rotationssymmetrie mit $V^{(\text{int})}(\mathbf{x}) = v^{(\text{int})}(|\mathbf{x}|)$ erhalten wir beispielsweise durch Verwendung von Kugelkoordinaten

$$V^{(\text{int})}(\mathbf{k}) = \frac{4\pi}{|\mathbf{k}|} \int_0^\infty dr r v^{(\text{int})}(r) \sin(|\mathbf{k}|r), \quad (5.4)$$

d.h. auch die Fourier-Transformierte ist rotationssymmetrisch: $V^{(\text{int})}(\mathbf{k}) = v^{(\text{int})}(|\mathbf{k}|)$.

Grundsätzlich unterscheidet man zwischen lang- und kurzreichweitigen Wechselwirkungen. Ein Beispiel für eine langreichweitige Wechselwirkung ist das Yukawa-Potential

$$V_Y^q(\mathbf{x}) = C \frac{e^{-q|\mathbf{x}|}}{|\mathbf{x}|}, \quad (5.5)$$

das im Limes $q \downarrow 0$ auf das Coulomb-Potential führt:

$$V_C(\mathbf{x}) = \lim_{q \downarrow 0} V_Y^q(\mathbf{x}) = \frac{C}{|\mathbf{x}|}. \quad (5.6)$$

Bezeichnen Q, Q' die Ladungen zweier punktförmiger Teilchen, so ist deren Wechselwirkungspotential durch (5.6) mit $C = QQ'/4\pi\epsilon_0$ in SI-Einheiten gegeben. Da das Yukawa-Potential (5.5) rotationssymmetrisch ist, erhalten wir für dessen Fourier-Transformierte mit Hilfe von (5.4):

$$V_Y^q(\mathbf{k}) = \frac{4\pi C}{\mathbf{k}^2 + q^2}. \quad (5.7)$$

Im Falle des Coulomb-Potentials gilt daher

$$V_C(\mathbf{k}) = \lim_{q \downarrow 0} V_Y^q(\mathbf{k}) = \frac{4\pi C}{\mathbf{k}^2}. \quad (5.8)$$

Wir bemerken, daß die Kondensation eines geladenen Bose-Gases schon vor längerer Zeit theoretisch untersucht wurde [19–22], eine experimentelle Realisierung aber bisher noch nicht gelungen ist. Zur Zeit wird aber sehr intensiv daran gearbeitet, die Kondensation eines Atomgases mit einer anderen langreichweitigen Wechselwirkung, nämlich der magnetischen Dipol-Dipol-Wechselwirkung, zu realisieren [23,24]:

$$V_{DD}(\mathbf{x}) = -\frac{\mu_0}{4\pi} \frac{3(\mathbf{x}\mathbf{m})^2 - \mathbf{m}^2\mathbf{x}^2}{|\mathbf{x}|^5}. \quad (5.9)$$

Diese Wechselwirkung besitzt die Besonderheit einer Anisotropie, da durch das magnetische Dipolmoment \mathbf{m} eine Vorzugsrichtung ausgezeichnet wird. Wählen wir beispielsweise $\mathbf{m} = (0, 0, m)$, so lautet (5.9):

$$V_{DD}(x, y, z) = -\frac{\mu_0 m^2}{4\pi} \frac{2z^2 - (x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2 + z^2)^{5/2}}. \quad (5.10)$$

Damit ist die magnetische Dipol-Dipol-Wechselwirkung in z -Richtung attraktiv

$$V_{DD}(0, 0, z) = -\frac{\mu_0 m^2}{2\pi} \frac{1}{|z|^3} < 0, \quad (5.11)$$

aber innerhalb der x, y -Ebene repulsiv:

$$V_{DD}(x, y, 0) = \frac{\mu_0 m^2}{4\pi} \frac{1}{(x^2 + y^2)^{3/2}} > 0. \quad (5.12)$$

Um die Fourier-Transformierte (5.3) der magnetischen Dipol-Dipol-Wechselwirkung (5.9) zu berechnen, wählen wir ein geeignetes Koordinatensystem mit

$$\mathbf{k} = k \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{m} = m \begin{pmatrix} \sin \alpha \cos \beta \\ \sin \alpha \sin \beta \\ \cos \alpha \end{pmatrix}, \quad \mathbf{x} = r \begin{pmatrix} \sin \vartheta \cos \varphi \\ \sin \vartheta \sin \varphi \\ \cos \vartheta \end{pmatrix} \quad (5.13)$$

und erhalten

$$\begin{aligned}
V_{\text{DD}}^a(\mathbf{k}) &= -\frac{\mu_0 m^2}{4\pi} \int_a^\infty \frac{dr}{r} \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta e^{-ikr \cos \vartheta} \int_0^{2\pi} d\varphi \\
&\times \left\{ 3 \sin^2 \alpha \sin^2 \vartheta \left[\cos^2 \beta \cos^2 \varphi + 2 \sin \beta \cos \beta \sin \varphi \cos \varphi + \sin^2 \beta \sin^2 \varphi \right] \right. \\
&\left. + 3 \cos^2 \alpha \cos^2 \vartheta + 6 \sin \alpha \cos \alpha \sin \vartheta \cos \vartheta \left[\cos \beta \cos \varphi + \sin \beta \sin \varphi \right] - 1 \right\}. \quad (5.14)
\end{aligned}$$

Als untere Integrationsgrenze beim radialen Integral wurde dabei ein Abschneideparameter a eingeführt, der eventuell auftretende UV-Singularitäten regularisieren soll. Aus physikalischer Sicht berücksichtigt der Abschneideparameter a , daß sich die Atome nicht überlappen können, und kann daher mit dem doppelten Atomradius identifiziert werden. Die Auswertung der φ -Integration reduziert (5.14) auf

$$V_{\text{DD}}^a(\mathbf{k}) = \frac{\mu_0 m^2}{4} (1 - 3 \cos^2 \alpha) \int_a^\infty \frac{dr}{r} \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta e^{-ikr \cos \vartheta} (3 \cos^2 \vartheta - 1), \quad (5.15)$$

und die anschließende Auswertung der ϑ -Integration ergibt

$$V_{\text{DD}}^a(\mathbf{k}) = \mu_0 m^2 (1 - 3 \cos^2 \alpha) \int_a^\infty \frac{dr}{r} \left\{ 3 \frac{\cos kr}{(kr)^2} - 3 \frac{\sin kr}{(kr)^3} + \frac{\sin kr}{kr} \right\}. \quad (5.16)$$

Das verbleibende r -Integral läßt sich mit Hilfe partieller Integrationen berechnen:

$$V_{\text{DD}}^a(\mathbf{k}) = \mu_0 m^2 (1 - 3 \cos^2 \alpha) \left\{ \frac{\cos ka}{(ka)^2} - \frac{\sin ka}{(ka)^3} \right\}. \quad (5.17)$$

In diesem Ergebnis für die Fourier-Transformierte der magnetischen Dipol-Dipol-Wechselwirkung mit Abschneideparameter a läßt sich nun der Grenzübergang $a \downarrow 0$ durchführen:

$$V_{\text{DD}}(\mathbf{k}) = \lim_{a \downarrow 0} V_{\text{DD}}^a(\mathbf{k}) = \frac{1}{3} \mu_0 m^2 (3 \cos^2 \alpha - 1). \quad (5.18)$$

Berücksichtigen wir noch $\cos \alpha = \mathbf{m}\mathbf{k}/mk$ von (5.13), so erhalten wir schließlich [23]:

$$V_{\text{DD}}(\mathbf{k}) = \frac{\mu_0}{3} \left\{ 3 \frac{(\mathbf{m}\mathbf{k})^2}{\mathbf{k}^2} - \mathbf{m}^2 \right\}. \quad (5.19)$$

Damit besitzt die Fourier-Transformierte (5.19) dieselbe Zylindersymmetrie wie die Wechselwirkung (5.9).

5.2 Schwerpunktsystem

Wir untersuchen nun, wie sich eine Wechselwirkung auf zwei unterscheidbare quantenmechanische Teilchen auswirkt. Hierzu haben wir die zugrunde liegende Schrödinger-Gleichung zu analysieren:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2M_1} \Delta_{\mathbf{x}_1} - \frac{\hbar^2}{2M_2} \Delta_{\mathbf{x}_2} + V^{(\text{int})}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \right\} \psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = E \psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2). \quad (5.20)$$

Wir transformieren nun von den individuellen Raumkoordinaten $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$ auf die Schwerpunktkoordinate \mathbf{X} und die Relativkoordinate \mathbf{x} :

$$\mathbf{X} = \frac{M_1 \mathbf{x}_1 + M_2 \mathbf{x}_2}{M_1 + M_2}, \quad \mathbf{x} = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2. \quad (5.21)$$

Hierzu beachten wir die Umkehrung von (5.21)

$$\mathbf{x}_1 = \mathbf{X} + \frac{M_2}{M_1 + M_2} \mathbf{x}, \quad \mathbf{x}_2 = \mathbf{X} - \frac{M_1}{M_1 + M_2} \mathbf{x}, \quad (5.22)$$

so daß (5.20) übergeht in

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2M_{\text{ges}}} \Delta_{\mathbf{X}} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\mathbf{x}} + V^{(\text{int})}(\mathbf{x}) \right\} \psi(\mathbf{X}, \mathbf{x}) = E \psi(\mathbf{X}, \mathbf{x}). \quad (5.23)$$

Hierbei bezeichnen M_{ges} bzw. μ die Gesamtmasse bzw. die reduzierte Masse:

$$M_{\text{ges}} = M_1 + M_2, \quad \mu = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}. \quad (5.24)$$

In der Schrödinger-Gleichung (5.23) läßt sich die freie Schwerpunktbewegung abseparieren

$$\psi(\mathbf{X}, \mathbf{x}) = \frac{e^{i\mathbf{K}\mathbf{X}}}{(2\pi)^3} \psi(\mathbf{x}), \quad E = \frac{\hbar^2 \mathbf{K}^2}{2M_{\text{ges}}} + \epsilon, \quad (5.25)$$

und wir erhalten für die Relativbewegung im Schwerpunktsystem:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\mathbf{x}} + V^{(\text{int})}(\mathbf{x}) \right\} \psi(\mathbf{x}) = \epsilon \psi(\mathbf{x}). \quad (5.26)$$

Demnach läßt sich das Problem zweier wechselwirkender Teilchen auf ein effektives Teilchen mit der reduzierten Masse μ reduzieren, das sich im Potential $V^{(\text{int})}(\mathbf{x})$ bewegt.

Im folgenden wollen wir Streulösungen von (5.26) untersuchen, so daß $\epsilon \geq 0$ vorausgesetzt werden kann. Wir führen dann den Wellenvektor \mathbf{k} und mit seinem Betrag $k = \sqrt{\mathbf{k}^2}$ gemäß

$$\epsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \quad (5.27)$$

ein und erhalten aus (5.26):

$$\left\{ \Delta_{\mathbf{x}} + k^2 - \frac{2\mu}{\hbar^2} V^{(\text{int})}(\mathbf{x}) \right\} \psi(\mathbf{x}) = 0. \quad (5.28)$$

Außerdem wollen wir annehmen, daß das Wechselwirkungspotential rotationssymmetrisch ist: $V^{(\text{int})}(\mathbf{x}) = v^{(\text{int})}(|\mathbf{x}|)$. Dann gilt in Kugelkoordinaten

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{r^2 \hbar^2} + k^2 - \frac{2\mu}{\hbar^2} v^{(\text{int})}(r) \right\} \psi(r, \vartheta, \varphi) = 0, \quad (5.29)$$

wobei $\hat{\mathbf{L}}^2$ das Betragsquadrat des Drehimpulsoperators darstellt. Die Winkelabhängigkeit der Wellenfunktion ist durch die Kugelflächenfunktionen $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ mit $l = 0, 1, 2, \dots$ und $m = -l, \dots, l$ gegeben, die dem Eigenwertproblem

$$\hat{\mathbf{L}}^2 Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (5.30)$$

genügen. Die Wellenfunktion zerfällt dann gemäß

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = R_l(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi), \quad (5.31)$$

und die Schrödinger-Gleichung für die Radialkomponente der Wellenfunktion lautet:

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 - \frac{2\mu}{\hbar^2} v^{(\text{int})}(r) \right\} R_l(r) = 0. \quad (5.32)$$

5.3 Freie Streulösungen

Liegt keine Wechselwirkung vor, d.h. $v^{(\text{int})}(r) = 0$, so vereinfacht sich (5.32) auf

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right\} R_l(r) = 0, \quad (5.33)$$

was sich mit der Substitution $\rho = kr$ auf die Form

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + 1 \right\} R_l(\rho) = 0 \quad (5.34)$$

bringen läßt. Wir betrachten zunächst $l = 0$, d.h. solche Wellenfunktionen, die rotationssymmetrisch sind:

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + 1 \right\} R_0(\rho) = 0. \quad (5.35)$$

Die beiden Fundamentallösungen von (5.35) lauten offensichtlich

$$R_0^{(1)}(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho}, \quad R_0^{(2)}(\rho) = -\frac{\cos \rho}{\rho}. \quad (5.36)$$

Nun betrachten wir den Fall $l \neq 0$ und führen die Substitution

$$R_l(\rho) = \rho^l \chi_l(\rho) \quad (5.37)$$

durch. Dadurch geht die Differentialgleichung (5.35) über in

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{2(l+1)}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + 1 \right\} \chi_l(\rho) = 0. \quad (5.38)$$

Differentiation von (5.38) bezüglich ρ führt auf

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{2(l+2)}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + 1 \right\} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \chi_l(\rho) = 0. \quad (5.39)$$

Der Vergleich von (5.38) und (5.39) ergibt die Identifikation

$$\chi_{l+1}(\rho) = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \chi_l(\rho), \quad (5.40)$$

so daß durch Iteration folgt

$$\chi_l(\rho) = \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right)^l \chi_0(\rho). \quad (5.41)$$

Damit liegt zwischen den Funktionen $\chi_l(\rho)$ bezüglich der Drehimpulsquantenzahl l eine Rekursionsrelation vor, wobei $\chi_0(\rho)$ wegen (5.37) durch (5.36) gegeben ist. Wir fassen nun die resultierenden Lösungen von (5.34) durch folgende Definitionen zusammen. Wir definieren zum einen die sphärischen Bessel-Funktionen

$$j_l(\rho) = (-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right)^l \frac{\sin \rho}{\rho} \quad (5.42)$$

und zum anderen die sphärischen Neumann-Funktionen

$$n_l(\rho) = -(-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right)^l \frac{\cos \rho}{\rho}, \quad (5.43)$$

wobei der Faktor $(-1)^l$ aus Konventionsgründen hinzugefügt wurde. Die ersten sphärischen Bessel- und Neumann-Funktionen lauten explizit:

$$j_0(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho}, \quad n_0(\rho) = \frac{\cos \rho}{\rho}, \quad (5.44)$$

$$j_1(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho^2} - \frac{\cos \rho}{\rho}, \quad n_1(\rho) = -\frac{\cos \rho}{\rho^2} - \frac{\sin \rho}{\rho}, \quad (5.45)$$

$$j_2(\rho) = \left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho} \right) \sin \rho - \frac{3}{\rho^2} \cos \rho, \quad n_2(\rho) = \left(-\frac{3}{\rho^3} + \frac{1}{\rho} \right) \cos \rho - \frac{3}{\rho^2} \sin \rho. \quad (5.46)$$

Für kleine Argumente verhalten sich diese Funktionen wie

$$j_l(\rho) \approx \frac{\rho^l}{(2l+1)!!}, \quad n_l(\rho) \approx -\frac{(2l-1)!!}{\rho^{l+1}}, \quad \rho \rightarrow 0, \quad (5.47)$$

d.h. $j_l(\rho)$ ist am Ursprung $\rho = 0$ endlich, während $n_l(\rho)$ dort divergiert, während sie für große Argumente gegeben sind durch

$$j_l(\rho) \approx \frac{\sin(\rho - l\pi/2)}{\rho}, \quad n_l(\rho) \approx -\frac{\cos(\rho - l\pi/2)}{\rho}, \quad \rho \rightarrow \infty. \quad (5.48)$$

Damit können wir die allgemeine Lösung von (5.33) durch eine Linearkombination der beiden Fundamentallösungen (5.42) und (5.43) angeben:

$$R_l(r) = A_l j_l(kr) + B_l n_l(kr). \quad (5.49)$$

Aus (5.47) folgt dann deren asymptotisches Verhalten

$$R_l(r) \approx \frac{A_l \sin(kr - l\pi/2) - B_l \cos(kr - l\pi/2)}{kr}, \quad r \rightarrow \infty, \quad (5.50)$$

das sich auf folgende Form bringen läßt

$$R_l(r) \approx \frac{C_l \sin(kr - l\pi/2 + \delta_l)}{kr}, \quad r \rightarrow \infty. \quad (5.51)$$

Hierbei sind Amplitude C_l und Phase δ_l gegeben durch

$$C_l = \sqrt{A_l^2 + B_l^2}, \quad \delta_l = -\arctan \frac{B_l}{A_l}. \quad (5.52)$$

Ist das Wechselwirkungspotential $v^{(\text{int})}(r)$ in (5.32) von Null verschieden, so wird die Radialkomponente der Wellenfunktion $R_l(r)$ im allgemeinen nicht mehr die Form (5.49) besitzen. Liegt aber eine kurzreichweitige Wechselwirkung vor, so können wir erwarten, daß $R_l(r)$ für große Abstände von der Form (5.51) ist. Die Phasenverschiebung δ_l ergibt sich dabei als Funktion vom Betrage k des Wellenvektors \mathbf{k} bzw. der Energie ϵ und der Stärke der Wechselwirkung. Das Vorzeichen der Phasenverschiebung können wir schon ohne Rechnung aus physikalischen Gründen verstehen. Für ein anziehendes Potential wird die Wellenfunktion im Außengebiet hereingezogen, d.h. $\delta_l > 0$. Für ein repulsives Potential dagegen wird die Wellenfunktion ins Außengebiet gedrückt und es ist $\delta_l < 0$.

5.4 Harte Kugeln

Als wichtiges Beispiel für eine kurzreichweitige Wechselwirkung betrachten wir das rotationssymmetrische Wechselwirkungspotential für harte Kugeln

$$v^{(\text{int})}(r) = \begin{cases} 0 & , r > a \\ \infty & , 0 \leq r \leq a, \end{cases} \quad (5.53)$$

wobei a den doppelten Kugelradius bezeichnet. Die Lösung der Schrödinger-Gleichung (5.32) mit dem Wechselwirkungspotential (5.53) ist dann gegeben durch

$$R_l(r) = \begin{cases} A_l j_l(kr) + B_l n_l(kr) & , r > a \\ 0 & , 0 \leq r \leq a. \end{cases} \quad (5.54)$$

Wir fordern, daß die Wellenfunktion an der Stelle $r = a$ stetig sein soll, so daß gilt:

$$A_l = D_l n_l(ka), \quad B_l = -D_l j_l(ka). \quad (5.55)$$

Für große Abstände ist die Radialkomponente der Wellenfunktion damit von der Form (5.51), wobei Amplitude C_l und Phase δ_l gegeben sind durch

$$C_l = D_l \sqrt{j_l^2(ka) + n_l^2(ka)}, \quad \delta_l = \arctan \frac{j_l(ka)}{n_l(ka)}. \quad (5.56)$$

Für kleine Kugelradien a bzw. kleine Energien (5.27) vereinfacht sich die Phasenverschiebung δ_l mit Hilfe von (5.47) zu

$$\delta_l \approx -\frac{(2l+1)(ka)^{2l+1}}{[(2l+1)!!]^2}. \quad (5.57)$$

Das Vorzeichen von δ_l ist negativ, da das Potential für harte Kugeln (5.53) eine abstoßende Wechselwirkung darstellt. Außerdem stellen wir fest, daß im Limes kleiner Kugelradien a bzw. kleiner Energien (5.27) die relevante Phasenverschiebung bei der s-Wellenstreuung auftritt. Die Beiträge höherer Drehimpulsquantenzahlen $l > 0$ sind in diesem Limes vernachlässigbar.

5.5 Pseudopotentialmethode

Wir diskutieren nun die Pseudopotentialmethode, die von Enrico Fermi begründet wurde, am Beispiele der s-Wellenstreuung [25,26]. Sie basiert auf der Idee, die harte Randbedingung bei $r = a$ durch eine Quelle bei $r = 0$ zu ersetzen, die das Verhalten der Wellenfunktion im Außengebiet $r > a$ getreu reproduziert. Damit setzen wir die Radialkomponente $R_0(r)$ aus (5.54) zu

$$\tilde{R}_0(r) = A_0 j_0(kr) + B_0 n_0(kr) \quad (5.58)$$

fort, so daß im physikalischen Bereich $r > a$ gilt: $R_0(r) = \tilde{R}_0(r)$. Die beiden Wellenfunktionen $R_0(r)$ und $\tilde{R}_0(r)$ sind daher nur im unphysikalischen Bereich $0 \leq r \leq a$ voneinander verschieden. Wir suchen einen Pseudopotentialoperator $\tilde{v}^{(\text{int})}(r)$, so daß die fortgesetzte Radialkomponente (5.58) die zu (5.32) analoge Schrödinger-Gleichung für $r \geq 0$ erfüllt:

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + k^2 - \frac{2\mu}{\hbar^2} \tilde{v}^{(\text{int})}(r) \right\} \tilde{R}_0(r) = 0. \quad (5.59)$$

Hierzu stellen wir fest, daß (5.58) für $r > 0$ schon die Differentialgleichung

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + k^2 \right\} \tilde{R}_0(r) = 0 \quad (5.60)$$

erfüllt. Demnach erwarten wir, daß der Pseudopotentialoperator $\tilde{v}^{(\text{int})}(r)$ in (5.59) eine Distribution darstellt, die am Ursprung $r = 0$ eine Singularität aufweist. Um dies näher zu untersuchen, betrachten wir eine Kugel $K(R)$ mit Radius R um den Ursprung und erhalten mit Hilfe des Gaußschen Satzes:

$$\int_{K(R)} d^3x (\Delta_{\mathbf{x}} + k^2) \tilde{R}_0(r) = \oint_{\partial K(R)} d\mathbf{f} \nabla_{\mathbf{x}} \tilde{R}_0(r) + k^2 \int_{K(R)} d^3x \tilde{R}_0(r). \quad (5.61)$$

Wir werten die rechte Seite mit Kugelkoordinaten aus und beachten dabei $d\mathbf{f} = R^2 \sin \vartheta d\vartheta d\varphi \mathbf{e}_r$ sowie $\nabla_{\mathbf{x}} \tilde{R}_0(r) = \tilde{R}'_0(r) \mathbf{e}_r$:

$$\int_{K(R)} d^3x (\Delta_{\mathbf{x}} + k^2) \tilde{R}_0(r) = 4\pi R^2 \frac{\partial \tilde{R}_0(R)}{\partial R} + 4\pi k^2 \int_0^R dr r^2 \tilde{R}_0(r). \quad (5.62)$$

Verwenden wir die Differentialgleichung (5.60) für den Integranden auf der rechten Seite, so erhalten wir schließlich:

$$\int_{K(R)} d^3x (\Delta_{\mathbf{x}} + k^2) \tilde{R}_0(r) = 4\pi \lim_{r \rightarrow 0} \left\{ r^2 \frac{\partial \tilde{R}_0(r)}{\partial r} \right\}, \quad (5.63)$$

was sich mit Hilfe von (5.44) und (5.58) reduziert auf

$$\int_K d^3x (\Delta_{\mathbf{x}} + k^2) \tilde{R}_0(r) = \frac{4\pi B_0}{k}. \quad (5.64)$$

Aus dem Vergleich von (5.60) und (5.64) lesen wir ab

$$(\Delta_{\mathbf{x}} + k^2) \tilde{R}_0(r) = \frac{4\pi B_0}{k} \delta(\mathbf{x}). \quad (5.65)$$

Hierbei ist noch zu klären, wie die Konstante B_0 mit der Radialkomponente (5.58) zusammenhängt. Aus (5.52) folgt

$$B_0 = -A_0 \tan \delta_0 \quad (5.66)$$

und aus (5.44) sowie (5.56) lesen wir die Phasenverschiebung der s-Wellenstreuung ab:

$$\delta_0 = -\arctan ka. \quad (5.67)$$

Ferner erhalten wir aus (5.44) und (5.58)

$$A_0 = \lim_{r \downarrow 0} \frac{\partial}{\partial r} \left\{ r \tilde{R}_0(r) \right\}, \quad (5.68)$$

so daß (5.65) schließlich übergeht in

$$(\Delta_{\mathbf{x}} + k^2) \tilde{R}_0(r) = \frac{4\pi \tan ka}{k} \delta(\mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial r} \left\{ r \tilde{R}_0(r) \right\}. \quad (5.69)$$

Aufgrund der Delta-Funktion auf der rechten Seite wurde der Hinweis auf die Auswertung an der Stelle $r = 0$ weggelassen. Der Vergleich von (5.59) und (5.69) führt damit auf den Pseudopotentialoperator

$$\tilde{v}^{\text{int}}(r) = \frac{2\pi \hbar^2}{\mu} \frac{\tan ka}{k} \delta(\mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial r} r. \quad (5.70)$$

Im Limes $a \rightarrow 0$ folgt hieraus

$$\tilde{v}^{\text{int}}(r) = g \delta(\mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial r} r, \quad (5.71)$$

wobei die Stärke der Wechselwirkung

$$g = \frac{2\pi \hbar^2 a}{\mu} \quad (5.72)$$

unabhängig von der Energie (5.27) ist. Wir beobachten, daß der Operator

$$\hat{O} \bullet = \frac{\partial}{\partial r} (r \bullet) \Big|_{r=0} \quad (5.73)$$

für am Ursprung reguläre Funktionen $f(r)$ die Eigenschaft

$$\hat{O} f(r) = f(0) \quad (5.74)$$

besitzt. Gilt dagegen $f(r) \rightarrow K/r$ für $r \rightarrow 0$, so folgt

$$\hat{O} f(r) = 0. \quad (5.75)$$

Demnach hat der Operator \hat{O} die Eigenschaft, etwaige $1/r$ -Singularitäten herauszuprojizieren. Ansonsten wirkt er wie eine Delta-Funktion. Wendet man den Operator \hat{O} auf eine Funktion an, die durch eine Fourier-Transformation gegeben ist, d.h.

$$f(r) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} f(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}, \quad (5.76)$$

so ist zwar der Integrand regulär am Ursprung $r = 0$, doch es könnte durch das Fourier-Integral eine $1/r$ -Singularität entstehen. Hierfür ist das Coulomb-Potential (5.6) ein wichtiges physikalisches Beispiel. Damit darf man den Pseudopotentialoperator nicht mit dem Fourier-Integral vertauschen, da sonst eine $1/r$ -Singularität nicht herausprojiziert wird und der Limes $r \rightarrow 0$ zu einer falschen UV-Divergenz führt. Man kann dies dadurch berücksichtigen, daß man einfach eventuell auftretende $1/\mathbf{k}^2$ -Singularitäten in der Fourier-Transformation abzieht. Oder man verwendet von vorneherein die Methode der dimensional Regularisierung, die das Auftreten solcher UV-Divergenzen beseitigt.

5.6 Streuamplitude

Wir werden nun die allgemeine Struktur der Streulösung $\psi(\mathbf{x})$ von (5.28) für eine beliebige 2-Teilchen-Wechselwirkung $V^{(\text{int})}(\mathbf{x})$ bestimmen [28]. Hierzu stellen wir fest, daß die Schrödinger-Gleichung (5.28) formal die Struktur einer inhomogenen Helmholtz-Gleichung besitzt

$$(\Delta_{\mathbf{x}} + k^2) \psi(\mathbf{x}) = F(\mathbf{x}), \quad (5.77)$$

wobei aber die Inhomogenität $F(\mathbf{x})$ noch von der gesuchten Streulösung $\psi(\mathbf{x})$ abhängt:

$$F(\mathbf{x}) = \frac{2\mu}{\hbar^2} V^{(\text{int})}(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}). \quad (5.78)$$

Eine formale Lösung von (5.77) ist durch

$$\psi(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} + \int d^3x' G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') F(\mathbf{x}') \quad (5.79)$$

gegeben. Aus mathematischer Sicht beschreibt dabei der erste Term eine homogene Lösung der Helmholtz-Gleichung, während der zweite Term eine inhomogene Lösung darstellt. Aus physikalischer Sicht ist dagegen $\psi(\mathbf{x})$ eine Summe aus einer einlaufenden ebenen Welle und einer Streuwelle. Dabei tritt die Greensche Funktion $G(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ der Helmholtz-Gleichung auf, die folgender Differentialgleichung genügt:

$$(\Delta_{\mathbf{x}} + k^2) G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (5.80)$$

Da die Inhomogenität von der Differenz der Koordinaten \mathbf{x} und \mathbf{x}' abhängt, wird das auch für die Greensche Funktion gelten:

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = G(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (5.81)$$

Setzen wir eine Fourier-Transformation an

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} G(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')}, \quad (5.82)$$

so folgt aus (5.80) eine algebraische Gleichung für die Fourier-Transformierte:

$$G(\mathbf{q}) = \frac{-1}{\mathbf{q}^2 - k^2}. \quad (5.83)$$

Die Greensche Funktion $G(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ folgt dann durch Einsetzen von (5.83) in (5.82) und durch Ausführung des verbleibenden \mathbf{q} -Integrales:

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{-1}{(2\pi)^3} \int d^3q \frac{e^{i\mathbf{q}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')}}{\mathbf{q}^2 - k^2}. \quad (5.84)$$

Dabei tritt beim Übergang zu Kugelkoordinaten das Problem auf, daß bei der Ausführung des radialen \mathbf{q} -Integrales ein Pol auf dem Integrationsweg liegt und daher das \mathbf{q} -Integral (5.84) nicht eindeutig definiert ist. Nach Feynman gibt es eine formale Vorschrift, wie man solche mehrdeutigen \mathbf{q} -Integrale unter Berücksichtigung der Kausalität eindeutig definieren kann. Hierzu ist zu dem "Massenterm k^2 " ein " $i\eta$ -Term" hinzuzufügen und der Limes $\eta \downarrow 0$ durchzuführen:

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{-1}{(2\pi)^3} \lim_{\eta \downarrow 0} \int d^3q \frac{e^{i\mathbf{q}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')}}{\mathbf{q}^2 - k^2 - i\eta}. \quad (5.85)$$

Beim Übergang zu Kugelkoordinaten folgt zunächst

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{-1}{4\pi^2} \lim_{\eta \downarrow 0} \int_0^\infty dq \frac{q^2}{q^2 - k^2 - i\eta} \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta e^{iq|\mathbf{x}-\mathbf{x}'| \cos \vartheta}, \quad (5.86)$$

wobei die Ausführung des ϑ -Integrales ergibt:

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{i}{4\pi^2 |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \lim_{\eta \downarrow 0} \int_{-\infty}^\infty dq \frac{q}{q^2 - k^2 - i\eta} e^{iq|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}. \quad (5.87)$$

Die Pole des Integranden liegen an den Stellen $q_\pm = \pm(k + i\eta/2k)$, d.h. einmal oberhalb und einmal unterhalb der reellen Achse. Das reelle Integral muß aufgrund der Exponentialfunktion in der oberen komplexen Halbebene geschlossen werden, so daß bei der Anwendung des Residuensatzes nur das Residuum an der Stelle $q_+ = k + i\eta/2k$ beiträgt:

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{-1}{2\pi |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \operatorname{Res}_{q=k} \left\{ \frac{q}{q^2 - k^2} e^{iq|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \right\}. \quad (5.88)$$

Damit stellt die Greensche Funktion eine nach Außen laufende Kugelwelle dar:

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = -\frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{4\pi |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}. \quad (5.89)$$

Außerdem folgt aus (5.78), (5.79) und (5.89) eine Integralgleichung für die Streulösung $\psi(\mathbf{x})$:

$$\psi(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3x' \frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} V^{(\text{int})}(\mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}'). \quad (5.90)$$

Bei den typischen Streuproblemen sind die Detektoren weit vom Streuer angebracht, d.h. es gilt $|\mathbf{x}| \gg |\mathbf{x}'|$. Damit erhalten wir die Näherung

$$k|\mathbf{x}-\mathbf{x}'| = k\sqrt{\mathbf{x}^2 - 2\mathbf{x}\mathbf{x}' + \mathbf{x}'^2} \approx kr - \mathbf{k}'\mathbf{x}' + \dots, \quad (5.91)$$

wobei $\mathbf{k}' = k\mathbf{x}/r$ mit $r = |\mathbf{x}|$. Weit entfernt vom Streuer hat die stationäre Lösung $\psi(\mathbf{x})$ nach (5.90) und (5.91) die Gestalt

$$\psi(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\vartheta, \varphi), \quad (5.92)$$

wobei als Streuamplitude

$$f(\vartheta, \varphi) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3x' e^{-\mathbf{k}'\mathbf{x}'} V^{(\text{int})}(\mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}') \quad (5.93)$$

eingeführt wurde. Sie hängt nur von der Richtung \mathbf{x}/r , nicht aber vom Abstand ab und hat die Dimension einer Länge. Mit (5.92) haben wir die allgemeine Gestalt der stationären Streulösungen im Fernfeld gefunden.

5.7 Wirkungsquerschnitt

Der differentielle Wirkungsquerschnitt $d\sigma/d\Omega$ gibt die Zahl der Teilchen $dN(\Omega)$ an, die pro Zeiteinheit dt und pro Winkelelement $d\Omega$ in das Winkelelement $d\Omega$ bei Ω gestreut werden bezogen auf die Stromdichte j_{rein} der einfallenden Teilchen:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{dN(\Omega)}{j_{\text{rein}}d\Omega dt}. \quad (5.94)$$

Der gesamte Wirkungsquerschnitt entsteht dann durch Integration über den Raumwinkel Ω mit $d\Omega = \sin\vartheta d\vartheta d\varphi$

$$\sigma = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\vartheta \sin\vartheta \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) (\vartheta, \varphi) \quad (5.95)$$

und besitzt die Dimension einer Fläche. In der Kernphysik wird der Wirkungsquerschnitt in der Einheit von 1 barn = 10^{-24} cm^2 angegeben [27]. Liegt eine Wellenfunktion $\psi(\mathbf{x})$ vor, so lautet deren Stromdichte

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}) = \frac{\hbar}{2\mu i} \left\{ \psi^*(\mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{x}} \psi(\mathbf{x}) - \psi(\mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{x}} \psi^*(\mathbf{x}) \right\}. \quad (5.96)$$

Wir betrachten zunächst die einlaufende ebene Welle $\psi_{\text{ein}}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}$ in (5.92), deren Stromdichte durch (5.96) gegeben ist durch

$$\mathbf{j}_{\text{ein}}(\mathbf{x}) = \frac{\hbar\mathbf{k}}{\mu}. \quad (5.97)$$

Der zweite Term in (5.92) beschreibt die radiale Streulösung

$$\psi_{\text{str}}(r, \vartheta, \varphi) = \frac{e^{ikr}}{r} f(\vartheta, \varphi). \quad (5.98)$$

Für den differentiellen Wirkungsquerschnitt ist nur die auslaufende radiale Komponente der Stromdichte von Interesse:

$$j_{\text{str}}(r, \vartheta, \varphi) = \frac{\hbar}{2\mu i} \left\{ \psi_{\text{str}}^*(r, \vartheta, \varphi) \frac{\partial}{\partial r} \psi_{\text{str}}(r, \vartheta, \varphi) - \psi_{\text{str}}(r, \vartheta, \varphi) \frac{\partial}{\partial r} \psi_{\text{str}}^*(r, \vartheta, \varphi) \right\}, \quad (5.99)$$

für die wir erhalten

$$j_{\text{str}}(r, \vartheta, \varphi) = \frac{\hbar k |f(\vartheta, \varphi)|^2}{\mu r^2}. \quad (5.100)$$

Hieraus ergibt sich die Zahl der gestreuten Teilchen gemäß

$$dN(\vartheta, \varphi) = j_{\text{str}}(r, \vartheta, \varphi) r^2 d\Omega dt. \quad (5.101)$$

Damit lautet der differentielle Wirkungsquerschnitt (5.94) mit Hilfe von (5.97), (5.100) und (5.101):

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) (\vartheta, \varphi) = |f(\vartheta, \varphi)|^2. \quad (5.102)$$

Der differentielle Wirkungsquerschnitt ist demnach durch das Betragsquadrat der Streuamplitude gegeben.

5.8 Partialwellen

Wir wollen nun die allgemeine Streulösung nach den entsprechenden Beiträgen der Drehimpulsquantenzahl l zerlegen, die man auch als Partialwellen bezeichnet. Hierzu setzen wir nun wieder voraus, daß das Potential rotationssymmetrisch ist: $V^{(\text{int})}(\mathbf{x}) = v^{(\text{int})}(|\mathbf{x}|)$. Wir betrachten zunächst die in (5.92) einlaufende ebene Welle und zerlegen diese nach der durch (5.31), (5.49) definierten sphärischen Basis:

$$e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \left\{ A_{lm} j_l(kr) + B_{lm} n_l(kr) \right\} Y_{lm}(\vartheta, \varphi). \quad (5.103)$$

Hierbei fallen die sphärischen Bessel-Funktionen $n_l(kr)$ weg, da sie gemäß (5.47) am Ursprung divergieren:

$$e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l A_{lm} j_l(kr) Y_{lm}(\vartheta, \varphi). \quad (5.104)$$

Außerdem wollen wir ohne Beschränkung der Allgemeinheit voraussetzen, daß die ebene Welle in z -Richtung einfallen möge. Da dann die linke Seite den Winkel φ nicht mehr enthält, muß

das auch für die rechte Seite gelten, d.h. es treten nur die Kugelflächenfunktionen $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ mit verschwindender Magnetquantenzahl m auf:

$$Y_{l0}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \vartheta). \quad (5.105)$$

Hierbei genügen die Legendre-Polynome

$$P_l(z) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dz^l} (z^2 - 1)^l \quad (5.106)$$

der Orthogonalitätsrelation

$$\int_{-1}^1 dz P_l(z) P_{l'}(z) = \frac{2\delta_{ll'}}{2l+1}. \quad (5.107)$$

Die ersten Legendre-Polynome lauten explizit:

$$P_0(z) = 1, \quad P_1(z) = z, \quad P_2(z) = \frac{1}{2}(3z^2 - 1), \quad P_3(z) = \frac{1}{2}(5z^3 - 3z), \quad \dots \quad (5.108)$$

Die Entwicklung (5.104) der ebenen Welle nach Kugelwellen reduziert sich damit auf

$$e^{ikr \cos \vartheta} = \sum_{l=0}^{\infty} A_l \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} j_l(kr) P_l(\cos \vartheta). \quad (5.109)$$

Zur Berechnung der Koeffizienten A_l multiplizieren wir (5.109) mit $P_l(\cos \vartheta)$ und integrieren über alle Winkel ϑ :

$$A_l j_l(kr) = \sqrt{\pi(2l+1)} \int_{-1}^1 dz P_l(z) e^{ikrz}. \quad (5.110)$$

Da diese Beziehung für alle r gelten muß, reicht es zur Berechnung von A_l aus, den Grenzfall kleiner r zu betrachten. Aufgrund von (5.47) gilt für $r \rightarrow 0$:

$$A_l \frac{(kr)^l}{(2l+1)!!} = \sqrt{\pi(2l+1)} \int_{-1}^1 dz P_l(z) \left\{ \dots + \frac{(ikrz)^{l-1}}{(l-1)!} + \frac{(ikrz)^l}{l!} + \frac{(ikrz)^{l+1}}{(l+1)!} + \dots \right\}. \quad (5.111)$$

Die Terme auf der rechten Seite $(ikrz)^n$ mit $n \geq l+1$ tragen im Limes $r \rightarrow 0$ nicht bei. Andererseits lesen wir aus (5.106), (5.108) ab, daß sich die Potenz z^n nach Legendre-Polynomen entwickeln läßt:

$$z^n = \frac{2^n (n!)^2}{(2n)!} P_n(z) + \sum_{m=0}^{n-1} c_m P_m(z). \quad (5.112)$$

Deshalb folgt aus (5.111) im Limes $r \rightarrow 0$:

$$A_l \frac{(kr)^l}{(2l+1)!!} = \sqrt{\pi(2l+1)} \int_{-1}^1 dz P_l(z) \frac{(ikr)^l}{l!} \frac{2^l (l!)^2}{(2l)!} P_l(z) + \dots, \quad (5.113)$$

woraus wir mit Hilfe der Orthogonalitätsrelation (5.107) ablesen:

$$A_l = i^l \sqrt{4\pi(2l+1)}. \quad (5.114)$$

Da aber (5.110) für alle r gültig sein muß, erhalten wir als Nebenresultat eine Integraldarstellung der sphärischen Bessel-Funktion:

$$j_l(x) = \frac{(-i)^l}{2} \int_{-1}^1 P_l(z) e^{ixz} . \quad (5.115)$$

Unser Hauptresultat besteht aber darin, daß wir aus (5.109) und (5.114) ablesen können, wie sich eine in z -Richtung ausbreitende ebene Welle nach Kugelwellen zerlegen läßt:

$$e^{ikr \cos \vartheta} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \vartheta) . \quad (5.116)$$

Aufgrund der Zylindersymmetrie des Streuproblems ist zu erwarten, daß die Streuamplitude $f(\vartheta, \varphi)$ nicht vom azimutalen Winkel φ abhängt: $f(\vartheta, \varphi) = f(\vartheta)$. Da aber die Legendre-Polynome $P_l(\cos \vartheta)$ eine Basis bilden, läßt sich die Streuamplitude nach diesen entwickeln

$$f(\vartheta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l P_l(\cos \vartheta) , \quad (5.117)$$

wobei die Entwicklungskoeffizienten f_l als Partialwellenamplituden bezeichnet werden. Für die Streulösung (5.92) gilt aufgrund von (5.116) und (5.117):

$$\psi(\mathbf{x}) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \vartheta) \left\{ i^l j_l(kr) + f_l \frac{e^{ikr}}{r} \right\} . \quad (5.118)$$

Das asymptotische Verhalten für große Abstände ist wegen (5.48) gegeben durch

$$\psi(\mathbf{x}) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1) P_l(\cos \vartheta)}{2ikr} \left\{ e^{ikr} [1 + 2ik f_l] - (-1)^l e^{-ikr} \right\} , \quad r \rightarrow \infty . \quad (5.119)$$

Der zweite Term beschreibt dabei eine einlaufende Kugelwelle, die vom Streuvorgang nicht beeinflusst wird. Demgegenüber stellt der erste Term eine auslaufende Kugelwelle dar, die durch die Streuung am Potential mit der Partialwellenamplitude f_l modifiziert wird. Andererseits wissen wir, daß die allgemeine Lösung der Schrödinger-Gleichung (5.29) aufgrund von (5.31) von der Form

$$\psi(\mathbf{x}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l C_{lm} R_l(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (5.120)$$

ist. Wegen der Zylindersymmetrie reduziert sich dann (5.120) unter Beachtung von (5.105) auf

$$\psi(\mathbf{x}) = \sum_{l=0}^{\infty} C_l R_l(r) P_l(\cos \vartheta) . \quad (5.121)$$

In Abschnitt 5.3 hatten wir diskutiert, daß das asymptotische Verhalten der Radialkomponente $R_l(r)$ gemäß (5.51) durch die Phasenverschiebung δ_l bestimmt wird. Für große Abstände erhalten wir daher

$$\psi(\mathbf{x}) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{c_l P_l(\cos \vartheta)}{2ikr} \left\{ (-i)^l e^{i\delta_l} e^{ikr} - i^l e^{-i\delta_l} e^{-ikr} \right\} , \quad r \rightarrow \infty . \quad (5.122)$$

Vergleichen wir zunächst die einlaufende Kugelwelle in (5.119) und (5.122), so wird die Amplitude c_l festgelegt durch

$$c_l = (2l + 1)i^l e^{i\delta_l}. \quad (5.123)$$

Vergleichen wir dann noch die auslaufende Kugelwelle in (5.119) und (5.122), so folgt hieraus eine Beziehung zwischen der Partialwellenamplitude f_l und der Phasenverschiebung δ_l :

$$f_l = \frac{e^{i\delta_l} \sin \delta_l}{k}. \quad (5.124)$$

Einsetzen von (5.124) in (5.117) führt auf die Streuamplitude

$$f(\vartheta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \vartheta), \quad (5.125)$$

und der differentielle Wirkungsquerschnitt (5.102) ergibt sich zu

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) (\vartheta) = \frac{1}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{l'=0}^{\infty} (2l + 1)(2l' + 1) e^{i(\delta_l - \delta_{l'})} \sin \delta_l \sin \delta_{l'} P_l(\cos \vartheta) P_{l'}(\cos \vartheta). \quad (5.126)$$

Während beim differentiellen Wirkungsquerschnitt (5.126) zwischen den verschiedenen Partialwellen Interferenzterme auftreten, sind die Partialwellenbeiträge im totalen Wirkungsquerschnitt (5.95) aufgrund der Orthogonalitätsrelation (5.107) additiv:

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) \sin^2 \delta_l. \quad (5.127)$$

Wir kehren nochmals zum Modell harter Kugeln von Abschnitt 5.4 zurück. Aufgrund von (5.57) dominiert für kleine Kugelradien bzw. kleine Energien (5.27) die s-Wellenstreuung. In diesem Limes reduziert sich (5.127) auf den Beitrag mit $l = 0$ und wir erhalten

$$\sigma = 4\pi a^2 \quad (5.128)$$

unabhängig von k . Deshalb bezeichnet man den Parameter a auch als s-Wellenstreulänge. Er charakterisiert für kleine Energien vollständig die Wechselwirkung. Wir bemerken, daß die s-Wellenstreulänge a sowohl positiv als auch negativ sein kann. Nach (5.71), (5.72) liegt dann ein repulsives bzw. ein attraktives Pseudopotential vor. Betrachten wir einmal einen typischen Zahlenwert, wie er z.B. im Experiment bei ^{87}Rb vorliegt. Dort ist die Wechselwirkung repulsiv mit einer s-Wellenstreulänge von $a \approx 100a_B$ gegeben, wobei $a_B \approx 0.529 \cdot 10^{-10}\text{m}$ den Bohr-Radius bezeichnet. Mit der Masse $M \approx 87 \cdot 1.67 \cdot 10^{-27}\text{kg}$ und der Temperatur $T \approx 300\text{nK}$ erhalten wir:

$$ka = \sqrt{\frac{2\pi k_B T M}{\hbar^2}} a \approx 0.097 \ll 1. \quad (5.129)$$

Hieran sehen wir, daß es tatsächlich gerechtfertigt ist, die höheren Partialwellen zu vernachlässigen und sich auf die s-Wellenstreuung zu beschränken.

5.9 Ununterscheidbare Teilchen

Bisher haben wir uns darauf beschränkt, die Streuung zweier unterscheidbarer Teilchen zu diskutieren. Nun wollen wir untersuchen, wie sich die einzelnen physikalischen Größen verändern, wenn wir die Streuung zweier ununterscheidbarer Teilchen betrachten. Wir stellen zunächst fest, daß bei identischen Teilchen ihre Massen übereinstimmen, d.h. $M_1 = M_2 = M$, so daß die reduzierte Masse (5.24) durch $\mu = M/2$ und die Stärke der Wechselwirkung (5.71), (5.72) durch

$$g = \frac{4\pi\hbar^2 a}{M} \quad (5.130)$$

gegeben ist. Außerdem ist zu berücksichtigen, daß die Streulösung bei Bosonen bzw. Fermionen unter dem Austausch beider Teilchen symmetrisch bzw. antisymmetrisch sein muß. Da die bisher verwendete Koordinate \mathbf{x} die Relativkoordinate (5.21) darstellt, führt ein Austausch beider Teilchen zur Substitution von \mathbf{x} nach $-\mathbf{x}$. Eine Symmetrisierung bzw. Antisymmetrisierung einer Streulösung $\psi(\mathbf{x})$ führt dann auf

$$\psi^\epsilon(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \psi(\mathbf{x}) + \epsilon \psi(-\mathbf{x}) \right\}. \quad (5.131)$$

Verwenden wir nun die Streulösung (5.92) mit der Eigenschaft $f(\vartheta, \varphi) = f(\vartheta)$ wegen der angenommenen Zylindersymmetrie, so geht (5.131) über in

$$\psi^\epsilon(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ e^{ikz} + \epsilon e^{-ikz} \right\} + \frac{e^{ikr}}{r} f^\epsilon(\vartheta), \quad (5.132)$$

wobei die Streuamplitude ununterscheidbarer Teilchen lautet

$$f^\epsilon(\vartheta) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ f(\vartheta) + \epsilon f(\pi - \vartheta) \right\}. \quad (5.133)$$

Deren Betragsquadrat führt auf den differentiellen Wirkungsquerschnitt ununterscheidbarer Teilchen

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)^\epsilon(\vartheta) = \frac{1}{2} \left| f(\vartheta) + \epsilon f(\pi - \vartheta) \right|^2. \quad (5.134)$$

Setzen wir hierin die Partialwellenzerlegung (5.117) der Streuamplitude ein, so müssen wir nach (5.106) beachten, daß

$$P_l(\cos \vartheta) = (-1)^l P_l(\cos(\pi - \vartheta)) \quad (5.135)$$

gilt und erhalten

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)^\epsilon(\vartheta) &= \frac{1}{2k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{l'=0}^{\infty} (2l+1)(2l'+1) e^{i(\delta_l - \delta_{l'})} \sin \delta_l \sin \delta_{l'} \\ &\times \left[1 + \epsilon (-1)^l \right] \left[1 + \epsilon (-1)^{l'} \right] P_l(\cos \vartheta) P_{l'}(\cos \vartheta). \end{aligned} \quad (5.136)$$

Für den totalen Wirkungsquerschnitt (5.95) ununterscheidbarer Teilchen erhalten wir dann mit der Orthogonalitätsrelation (5.107):

$$\sigma^\epsilon = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l \left[1 + \epsilon (-1)^l \right]^2. \quad (5.137)$$

Beim Modell harter Kugeln erhalten wir mit (5.57) für kleine Kugelradien bzw. kleine Energien (5.27) einen totalen Wirkungsquerschnitt, der nur von der s-Wellenstreuung dominiert wird:

$$\sigma^\epsilon = 2\pi a^2 (1 + \epsilon)^2. \quad (5.138)$$

Im Falle von Bosonen ($\epsilon = +1$) erhalten wir demnach einen totalen Wirkungsquerschnitt

$$\sigma^{+1} = 8\pi a^2, \quad (5.139)$$

der gegenüber dem totalen Wirkungsquerschnitt (5.128) zweier unterscheidbarer Teilchen um einen Faktor 2 vergrößert ist. Im Falle von Fermionen ($\epsilon = -1$) erhalten wir dagegen aus (5.138) einen verschwindenden totalen Wirkungsquerschnitt:

$$\sigma^{-1} = 0. \quad (5.140)$$

Dies besagt, daß bei Fermionen aufgrund der Antisymmetrisierung die s-Wellenstreuung keinen Beitrag zur Streuung leistet. Die Beiträge höherer Partialwellen $l > 0$ sind aber gemäß (5.57) mit $(ka)^{2l+1}$ unterdrückt und daher für den Limes (5.129) vernachlässigbar. Demnach kann man also die Streuung von Fermionen beim Modell harter Kugeln vernachlässigen.

Kapitel 6

Thermodynamische Eigenschaften der Kondensate

6.1 Bose-Gas mit Wechselwirkung

Im folgenden werden wir untersuchen, welchen Einfluß eine Wechselwirkung auf die thermodynamischen Eigenschaften eines Bose-Gases hat. Dabei werden wir annehmen, daß das Bose-Gas so stark verdünnt ist, daß eine Wechselwirkung zwischen mehr als zwei Teilchen vernachlässigbar klein ist. Bei diesen kleinen Teilchendichten ist es gerechtfertigt, sich auf die 2-Teilchen-Wechselwirkung zu beschränken. Die großkanonische Zustandssumme eines solchen verdünnten wechselwirkenden Bose-Gases ergibt sich aus dem Funktionalintegral

$$\mathcal{Z} = \oint \mathcal{D}\psi^* \oint \mathcal{D}\psi e^{-\mathcal{A}[\psi^*, \psi]/\hbar}, \quad (6.1)$$

wobei die euklidische Wirkung aus zwei Beiträgen besteht:

$$\mathcal{A}[\psi^*, \psi] = \mathcal{A}^{(0)}[\psi^*, \psi] + \mathcal{A}^{(\text{int})}[\psi^*, \psi]. \quad (6.2)$$

Neben der bisher schon behandelten euklidischen Wirkung eines wechselwirkungsfreien Bose-Gases

$$\mathcal{A}^{(0)}[\psi^*, \psi] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \psi^*(\mathbf{x}, \tau) \left\{ \hbar \frac{\partial}{\partial \tau} + \hat{H}(\mathbf{x}) - \mu \right\} \psi(\mathbf{x}, \tau) \quad (6.3)$$

mit dem 1-Teilchen-Hamilton-Operator (2.53) tritt noch zusätzlich ein wechselwirkender Anteil $\mathcal{A}^{(\text{int})}[\psi^*, \psi]$ auf. Dieser neue Beitrag ergibt sich dadurch, daß das Wechselwirkungspotential $V^{(\text{int})}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ mit den Teilchendichten $\psi^*(\mathbf{x}, \tau)\psi(\mathbf{x}, \tau)$ bzw. $\psi^*(\mathbf{x}', \tau)\psi(\mathbf{x}', \tau)$ am Orte \mathbf{x} bzw. \mathbf{x}' multipliziert wird und dann über alle Orte \mathbf{x}, \mathbf{x}' und Imaginärzeiten τ integriert wird. Die so entstehende Wechselwirkungsenergie ist bilokal im Ort aber lokal in der Imaginärzeit:

$$\mathcal{A}^{(\text{int})}[\psi^*, \psi] = \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \int d^D x' V^{(\text{int})}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \psi^*(\mathbf{x}, \tau)\psi(\mathbf{x}, \tau)\psi^*(\mathbf{x}', \tau)\psi(\mathbf{x}', \tau). \quad (6.4)$$

In der Hochtemperaturphase läßt sich der Einfluß der 2-Teilchen-Wechselwirkung (6.4) auf die thermodynamischen Eigenschaften der verdünnten Bose-Gase störungstheoretisch beschreiben. In

der Tieftemperaturphase verändern aber schon sehr schwache Wechselwirkungen die Eigenschaften der Bose-Einstein-Kondensate nicht nur quantitativ sondern sogar qualitativ. Deshalb müssen schwach wechselwirkende Bose-Gase unterhalb der kritischen Temperatur nichtstörungstheoretisch beschrieben werden. Hierzu berechnet man die effektive Wirkung $\Gamma[\Psi^*, \Psi]$ in dem Limes, daß das in (6.1) auftretende zweitquantisierte Plancksche Wirkungsquantum \hbar gegen Null geht. Das bedeutet, daß das entsprechende Funktionalintegral im Rahmen einer Sattelpunktsnäherung auszuwerten ist.

6.2 Stirling-Formel

Wir erläutern zunächst die Sattelpunktsnäherung am Beispiele eines eindimensionalen Integrales, das auf eine wichtige Näherungsformel der Fakultät $N!$ für große N führt. Ausgangspunkt unserer Überlegungen ist die Integraldarstellung der Gamma-Funktion

$$\Gamma(N+1) = \int_0^\infty dt t^N e^{-t}. \quad (6.5)$$

Hieraus erhalten wir eine entsprechende Integraldarstellung der Fakultät

$$N! = N^{N+1} \int_0^\infty d\tau e^{Nf(\tau)}, \quad (6.6)$$

wobei die Funktion $f(\tau)$ gegeben ist durch

$$f(\tau) = \ln \tau - \tau. \quad (6.7)$$

Im Limes $N \rightarrow \infty$ ist der Integrand von (6.6) um diejenige Stelle $\tau = \tau_e$ konzentriert, die die Funktion (6.7) extremalisiert:

$$\frac{df(\tau)}{d\tau} = \frac{1}{\tau} - 1 = 0 \quad \rightarrow \quad \tau_e = 1. \quad (6.8)$$

Deshalb entwickeln wir die Funktion (6.7) um diesen Sattelpunkt (6.8)

$$f(\tau) = -1 - \frac{1}{2}(\tau - 1)^2 + \frac{1}{3}(\tau - 1)^3 - \frac{1}{4}(\tau - 1)^4 + \dots \quad (6.9)$$

und erhalten aus (6.6):

$$N! = N^{N+1} e^{-N} \int_0^\infty d\tau \exp \left\{ -\frac{N}{2}(\tau - 1)^2 + \frac{N}{3}(\tau - 1)^3 - \frac{N}{4}(\tau - 1)^4 + \dots \right\}. \quad (6.10)$$

Die untere Integrationsgrenze in (6.10) läßt sich von 0 nach $-\infty$ ausdehnen. Das dadurch hinzugefügte Integral führt im Limes $N \rightarrow \infty$ zu einer exponentiellen Korrektur, die gegenüber den zu erwartenden polynomialen Termen zu vernachlässigen ist. In der Tat können wir folgende Abschätzung vornehmen:

$$\int_{-\infty}^0 d\tau \exp \left\{ -\frac{N}{2}(\tau - 1)^2 + \frac{N}{3}(\tau - 1)^3 - \frac{N}{4}(\tau - 1)^4 + \dots \right\} = \int_1^\infty d\tau \exp \left\{ -\frac{N}{2}\tau^2 - \frac{N}{3}\tau^3 - \frac{N}{4}\tau^4 + \dots \right\} \leq \int_1^\infty d\tau e^{-N\tau^2/2} \leq \int_1^\infty d\tau \tau e^{-N\tau^2/2} \leq \frac{1}{N} e^{-N/2}. \quad (6.11)$$

Damit geht (6.10) über in

$$N! = N^{N+1} e^{-N} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \exp \left\{ -\frac{N}{2} \tau^2 + \frac{N}{3} \tau^3 - \frac{N}{4} \tau^4 + \dots \right\}. \quad (6.12)$$

Im Limes $N \rightarrow \infty$ ist die Exponentialfunktion mit den Termen τ^3, τ^4, \dots in eine Taylor-Reihe zu entwickeln. Dabei ist zu beachten, daß aufgrund der Integrale

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\tau \tau^{2n} e^{-N\tau^2/2} = \sqrt{\frac{2\pi}{N}} \frac{(2n-1)!!}{N^n} \quad (6.13)$$

die Variable τ von der Ordnung $N^{-1/2}$ ist. Wir müssen deshalb folgende Terme berücksichtigen:

$$N! = N^{N+1} e^{-N} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \left\{ 1 - \frac{N}{4} \tau^4 + \frac{N^2}{18} \tau^6 + \dots \right\} e^{-N\tau^2/2}. \quad (6.14)$$

Mit Hilfe von (6.13) geht dann (6.14) über in die Stirling-Formel:

$$N! = \sqrt{2\pi N} \left(\frac{N}{e} \right)^N \left\{ 1 + \frac{1}{12N} + \dots \right\}. \quad (6.15)$$

6.3 Effektives Potential in Klassischer Statistik

Nun diskutieren wir am Beispiele der klassischen Statistik, wie man ein effektives Potential, das den Einfluß thermischer Fluktuationen beschreibt, mit Hilfe der Sattelpunktsnäherung berechnet. Hierzu betrachten wir zunächst die Zustandssumme der klassischen Statistik

$$Z(j) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\lambda} e^{-\beta V(x,j)} \quad (6.16)$$

mit der thermischen de Broglie-Wellenlänge (2.11) und dem Potential

$$V(x, j) = V(x) - xj. \quad (6.17)$$

Durch die Einführung des Stromes j ist es möglich, den Erwartungswert

$$X(j) = \frac{1}{Z(j)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\lambda} x e^{-\beta V(x,j)} \quad (6.18)$$

aus der freien Energie

$$F(j) = -\frac{1}{\beta} \ln Z(j) \quad (6.19)$$

zu bestimmen:

$$X(j) = -\frac{\partial F(j)}{\partial j}. \quad (6.20)$$

Wir betrachten (6.20) als Ausgangspunkt, um die freie Energie $F(j)$ bezüglich des Stromes j einer Legendre-Transformation zu unterziehen. Hierzu denken wir uns den durch (6.20) gegebenen

Zusammenhang $X = X(j)$ invertiert zu $j = j(X)$ und definieren als Legendre-Transformation das effektive Potential

$$V_{\text{eff}}(X) = F(j(X)) + j(X)X. \quad (6.21)$$

Für die partielle Ableitung des effektiven Potentials (6.21) erhalten wir dann unter Beachtung der Legendre-Identität (6.20):

$$\frac{\partial V_{\text{eff}}(X)}{\partial X} = j(X). \quad (6.22)$$

Im Limes $j \rightarrow 0$ lesen wir aus (6.21) und (6.22) ab, daß sich die freie Energie gemäß

$$F = V_{\text{eff}}(X_e) \quad (6.23)$$

durch Auswertung des effektiven Potentials an seinem Extremum ergibt. Hierbei ist der Extremalwert X_e definiert durch

$$\frac{\partial V_{\text{eff}}(X_e)}{\partial X_e} = 0. \quad (6.24)$$

Nun berechnen wir die Legendre-Transformation (6.21), die auf das effektive Potential $V_{\text{eff}}(X)$ führt, im Limes $\beta \rightarrow \infty$. Hierzu ist das Integral (6.16) mit Hilfe einer Sattelpunktsnäherung auszuwerten. Dabei genügt der Sattelpunkt $x_0 = x_0(j)$ der Gleichung

$$\left. \frac{\partial V(x, j)}{\partial x} \right|_{x=x_0} = 0 \quad \rightarrow \quad V^{(1)}(x_0) = j. \quad (6.25)$$

Eine Taylor-Entwicklung des Gesamtpotentials $V(x, j)$ um den Sattelpunkt x_0 ergibt:

$$V(x, j) = V(x_0, j) + \frac{1}{2} V^{(2)}(x_0) \delta x^2 + \frac{1}{6} V^{(3)}(x_0) \delta x^3 + \frac{1}{24} V^{(4)}(x_0) \delta x^4 + \dots \quad (6.26)$$

Hierbei fehlt der lineare Term in (6.26) wegen (6.25) und $\delta x = x - x_0$ stellt die Abweichung zum Sattelpunkt x_0 dar. Einsetzen von (6.26) in (6.16) und Entwicklung der Exponentialfunktion in δx führt auf

$$\begin{aligned} Z(j) = e^{-\beta V(x_0, j)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\delta x}{\lambda} \left\{ 1 - \frac{\beta}{6} V^{(3)}(x_0) \delta x^3 - \frac{\beta}{24} V^{(4)}(x_0) \delta x^4 \right. \\ \left. + \frac{\beta^2}{72} V^{(3)}(x_0)^2 \delta x^6 + \dots \right\} \exp \left\{ -\frac{\beta}{2} V^{(2)}(x_0) \delta x^2 \right\}. \end{aligned} \quad (6.27)$$

Hierbei wurden alle Terme berücksichtigt, die zur Berechnung von $Z(j)$ bis zur Ordnung $1/\beta$ benötigt werden. Dabei ist zu beachten, daß δx von der Ordnung $\beta^{-1/2}$ ist. Die Auswertung von (6.27) ergibt mit Hilfe der Integrale (6.13):

$$Z(j) = \frac{e^{-\beta V(x_0, j)}}{\hbar \beta \sqrt{V^{(2)}(x_0)}/M} \left\{ 1 - \frac{V^{(4)}(x_0)}{8\beta V^{(2)}(x_0)^2} + \frac{5V^{(3)}(x_0)^2}{24\beta V^{(2)}(x_0)^3} + \dots \right\}. \quad (6.28)$$

Damit erhalten wir für die freie Energie (6.19) bis zur Ordnung $1/\beta^2$:

$$F(j) = V(x_0) - x_0 j + \frac{1}{\beta} \ln \left(\hbar \beta \sqrt{\frac{V^{(2)}(x_0)}{M}} \right) + \frac{1}{\beta^2} \left\{ \frac{V^{(4)}(x_0)}{8V^{(2)}(x_0)^2} - \frac{5V^{(3)}(x_0)^2}{24V^{(2)}(x_0)^3} + \dots \right\}. \quad (6.29)$$

Aus (6.20) und (6.29) folgt für den Erwartungswert bis zur Ordnung $1/\beta$:

$$X = -\left\{V^{(1)}(x_0) - j\right\} \frac{\partial x_0}{\partial j} + x_0 - \frac{V^{(3)}(x_0)}{2\beta V^{(2)}(x_0)} \frac{\partial x_0}{\partial j} + \dots \quad (6.30)$$

Der erste Term verschwindet wegen (6.25). Für die in (6.30) auftretende Ableitung $\partial x_0/\partial j$ erhalten wir mit Hilfe von (6.25):

$$\frac{\partial x_0}{\partial j} = \left(\frac{\partial j}{\partial x_0}\right)^{-1} = \frac{1}{V^{(2)}(x_0)}. \quad (6.31)$$

Damit reduziert sich (6.30) auf

$$X(x_0) = x_0 - \frac{V^{(3)}(x_0)}{2\beta V^{(2)}(x_0)^2} + \dots \quad (6.32)$$

Die Invertierung von (6.32) führt auf

$$x_0(X) = X + \frac{V^{(3)}(X)}{2\beta V^{(2)}(X)^2} + \frac{1}{\beta^2} x_0^{(2)}(X) + \dots \quad (6.33)$$

Hierbei wurde formal noch der nächste Term in der Entwicklung berücksichtigt. Nun sind wir in der Lage, das effektive Potential bis zur Ordnung $1/\beta^2$ zu berechnen. Dabei wird sich herausstellen, daß dafür die explizite Form von $x_0^{(2)}(X)$ nicht benötigt wird. Aus (6.21), (6.25), (6.29) und (6.33) folgt durch Taylor-Entwicklung schließlich:

$$V_{\text{eff}}(X) = V(X) + \frac{1}{\beta} \ln \left(\hbar \beta \sqrt{\frac{V^{(2)}(X)}{M}} \right) + \frac{1}{\beta^2} \left\{ \frac{V^{(4)}(X)}{8V^{(2)}(X)^2} - \frac{V^{(3)}(X)^2}{12V^{(2)}(X)^3} + \dots \right\}. \quad (6.34)$$

6.4 Background-Methode für Effektives Potential

Wie wir gesehen haben, ist es unter Umständen sehr aufwendig, die Legendre-Transformation, die auf das effektive Potential $V_{\text{eff}}(X)$ führt, im Rahmen einer Sattelpunktsnäherung auszuwerten. Daher stellen wir im folgenden die sogenannte Background-Methode vor, die eine effiziente Berechnung des effektiven Potentials $V_{\text{eff}}(X)$ im Limes $\beta \rightarrow \infty$ ohne Verwendung der Legendre-Transformation ermöglicht [2,29,30]. Hierzu gehen wir aus von der Zustandssumme

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\lambda} e^{-\beta V(x)} \quad (6.35)$$

und zerlegen die Integrationsvariable x in den Background X und die Abweichungen $\delta x = x - X$. Eine Taylor-Entwicklung des Potentials $V(x)$ um den Background X führt dabei auf

$$V(X + \delta x) = V(X) + V^{(1)}(X)\delta x + \frac{1}{2} V^{(2)}(X)\delta x^2 + \frac{1}{6} V^{(3)}(X)\delta x^3 + \frac{1}{24} V^{(4)}(X)\delta x^4 + \dots \quad (6.36)$$

Eine ad hoc-Regel der Background-Methode besagt nun, daß beim Einsetzen von (6.36) in (6.35) der Term $V^{(1)}(X)\delta x$, der linear in der Abweichung δx ist, nicht berücksichtigt werden darf. Wir

betrachten daher zunächst nur die Beiträge, die in den Abweichungen δx von nullter und zweiter Ordnung sind:

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\delta x}{\lambda} \exp \left\{ -\beta V(X) - \frac{\beta}{2} V^{(2)}(X) \delta x^2 + \dots \right\} = \frac{e^{-\beta V(X)}}{\hbar \beta \sqrt{V^{(2)}(X)/M}} \left\{ 1 + \dots \right\}. \quad (6.37)$$

Das effektive Potential $V_{\text{eff}}(X)$ übernimmt in der Background-Methode die Rolle der freien Energie, d.h. es gilt

$$V_{\text{eff}}(X) = -\frac{1}{\beta} \ln Z. \quad (6.38)$$

Daher erhalten wir aus (6.37) das Resultat

$$V_{\text{eff}}(X) = V(X) + \frac{1}{\beta} \ln \left(\hbar \beta \sqrt{\frac{V^{(2)}(X)}{M}} \right) + V_{\text{eff}}^{(\text{cor})}(X). \quad (6.39)$$

Die restlichen Beiträge zum effektiven Potential $V_{\text{eff}}^{(\text{cor})}(X)$ werden im Rahmen der Background-Methode durch Feynman-Diagramme charakterisiert. Es zeigt sich dabei, daß $V_{\text{eff}}^{(\text{cor})}(X)$ aus allen 1-Teilchen-irreduziblen Vakuumdiagrammen besteht, die sich mit den folgenden Feynman-Regeln bilden lassen:

$$\text{---} \equiv \frac{1}{\beta V^{(2)}(X)}, \quad \text{---} \text{---} \equiv -\frac{\beta}{6} V^{(3)}(X), \quad \text{---} \times \text{---} \equiv -\frac{\beta}{24} V^{(4)}(X), \quad \dots \quad (6.40)$$

Hierbei bedeutet die Eigenschaft, daß ein Vakuumdiagramm 1-Teilchen-irreduzibel ist, daß es nach dem Durchschneiden einer beliebigen Linie nicht auseinander fällt. Die $1/\beta^2$ -Beiträge des effektiven Potentials sind damit gegeben durch

$$V_{\text{eff}}^{(\text{cor})}(X) = -\frac{1}{\beta} \left\{ 3 \text{---} \text{---} + 3 \text{---} \right\} + \dots \quad (6.41)$$

Die dabei auftretenden Gewichte der Vakuumdiagramme ergeben sich dadurch, daß deren Multiplizität durch die Fakultät der Ordnung zu teilen ist. So besitzt beispielsweise das zweite Vakuumdiagramm in (6.41) die Multiplizität 6 und ist von zweiter Ordnung, so daß sich hieraus das Gewicht $6/2! = 3$ ergibt. Wertet man die 1-Teilchen-irreduziblen Vakuumdiagramme (6.41) mit den Feynman-Regeln (6.40) aus, so erhalten wir das Ergebnis

$$V_{\text{eff}}^{(\text{cor})}(X) = \frac{1}{\beta^2} \left\{ \frac{V^{(4)}(X)}{8V^{(2)}(X)^2} - \frac{V^{(3)}(X)^2}{12V^{(2)}(X)^3} \right\}. \quad (6.42)$$

Wir sehen, daß (6.39) und (6.42) offensichtlich mit (6.34) übereinstimmt.

6.5 Background-Methode für Effektive Wirkung

Wir berechnen nun mit Hilfe der Background-Methode die effektive Wirkung eines schwach wechselwirkenden Bose-Gases. Hierzu zerlegen wir die Bose-Felder $\psi^*(\mathbf{x}, \tau)$, $\psi(\mathbf{x}, \tau)$ in die Background-Felder $\Psi^*(\mathbf{x}, \tau)$, $\Psi(\mathbf{x}, \tau)$ und die Fluktuationfelder $\delta\psi^*(\mathbf{x}, \tau)$, $\delta\psi(\mathbf{x}, \tau)$:

$$\psi^*(\mathbf{x}, \tau) = \Psi^*(\mathbf{x}, \tau) + \delta\psi^*(\mathbf{x}, \tau), \quad \psi(\mathbf{x}, \tau) = \Psi(\mathbf{x}, \tau) + \delta\psi(\mathbf{x}, \tau). \quad (6.43)$$

Damit erhalten wir beispielsweise für die Teilchendichte:

$$\begin{aligned} \psi^*(\mathbf{x}, \tau)\psi(\mathbf{x}, \tau) &= \Psi^*(\mathbf{x}, \tau)\Psi(\mathbf{x}, \tau) + \Psi^*(\mathbf{x}, \tau)\delta\psi(\mathbf{x}, \tau) \\ &\quad + \delta\psi^*(\mathbf{x}, \tau)\Psi(\mathbf{x}, \tau) + \delta\psi^*(\mathbf{x}, \tau)\delta\psi(\mathbf{x}, \tau). \end{aligned} \quad (6.44)$$

Setzen wir die Zerlegung (6.43) in die euklidische Wirkung (6.2)–(6.4) des schwach wechselwirkenden Bose-Gases ein, so ergibt sich unter Beachtung von (6.44) und der Symmetrie der Wechselwirkung $V^{(\text{int})}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = V^{(\text{int})}(\mathbf{x}', \mathbf{x})$:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}[\Psi^* + \delta\psi^*, \Psi + \delta\psi] &= \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \left\{ \Psi^*(\mathbf{x}, \tau) \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} + \hat{H}(\mathbf{x}) - \mu \right] \Psi(\mathbf{x}, \tau) \right. \\ &\quad + \Psi^*(\mathbf{x}, \tau) \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} + \hat{H}(\mathbf{x}) - \mu \right] \delta\psi(\mathbf{x}, \tau) + \delta\psi^*(\mathbf{x}, \tau) \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} + \hat{H}(\mathbf{x}) - \mu \right] \Psi(\mathbf{x}, \tau) \\ &\quad \left. + \delta\psi^*(\mathbf{x}, \tau) \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} + \hat{H}(\mathbf{x}) - \mu \right] \delta\psi(\mathbf{x}, \tau) \right\} + \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \int d^D x' V^{(\text{int})}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \\ &\quad \times \left\{ \left[\Psi^*(\mathbf{x}, \tau)\delta\psi(\mathbf{x}, \tau) + \delta\psi^*(\mathbf{x}, \tau)\Psi(\mathbf{x}, \tau) \right] \left[\Psi^*(\mathbf{x}', \tau)\delta\psi(\mathbf{x}', \tau) + \delta\psi^*(\mathbf{x}', \tau)\Psi(\mathbf{x}', \tau) \right] \right. \\ &\quad + \Psi^*(\mathbf{x}, \tau)\Psi(\mathbf{x}, \tau)\Psi^*(\mathbf{x}', \tau)\Psi(\mathbf{x}', \tau) + \delta\psi^*(\mathbf{x}, \tau)\delta\psi(\mathbf{x}, \tau)\delta\psi^*(\mathbf{x}', \tau)\delta\psi(\mathbf{x}', \tau) \\ &\quad + 2 \left[\Psi^*(\mathbf{x}, \tau)\Psi(\mathbf{x}, \tau) + \delta\psi^*(\mathbf{x}, \tau)\delta\psi(\mathbf{x}, \tau) \right] \left[\Psi^*(\mathbf{x}', \tau)\delta\psi(\mathbf{x}', \tau) + \delta\psi^*(\mathbf{x}', \tau)\Psi(\mathbf{x}', \tau) \right] \\ &\quad \left. + 2\Psi^*(\mathbf{x}, \tau)\Psi(\mathbf{x}, \tau)\delta\psi^*(\mathbf{x}', \tau)\delta\psi(\mathbf{x}', \tau) \right\}. \end{aligned} \quad (6.45)$$

Die einzelnen Terme in (6.45) unterscheiden sich dahingehend, wieviele Faktoren die Fluktuationfelder $\delta\psi^*(\mathbf{x}, \tau)$, $\delta\psi(\mathbf{x}, \tau)$ beinhalten. Damit erhalten wir die Zerlegung

$$\mathcal{A}[\Psi^* + \delta\psi^*, \Psi + \delta\psi] = \mathcal{A}^{(0)}[\delta\psi^*, \delta\psi] + \mathcal{A}^{(1)}[\delta\psi^*, \delta\psi] + \mathcal{A}^{(2)}[\delta\psi^*, \delta\psi] + \mathcal{A}^{(\text{cor})}[\delta\psi^*, \delta\psi]. \quad (6.46)$$

Die Terme in (6.45), die keine Fluktuationfelder $\delta\psi^*(\mathbf{x}, \tau)$, $\delta\psi(\mathbf{x}, \tau)$ enthalten, entsprechen gerade der euklidischen Wirkung (6.2)–(6.4) ausgewertet an den Background-Feldern $\Psi^*(\mathbf{x}, \tau)$, $\Psi(\mathbf{x}, \tau)$:

$$\mathcal{A}^{(0)}[\delta\psi^*, \delta\psi] = \mathcal{A}[\Psi^*, \Psi]. \quad (6.47)$$

Im Rahmen der Background-Methode werden diejenigen Terme in (6.45), die linear in den Fluktuationfelder $\delta\psi^*(\mathbf{x}, \tau)$, $\delta\psi(\mathbf{x}, \tau)$ sind, nicht weiter berücksichtigt. Es ist daher nicht notwendig, diese vier Beiträge zu $\mathcal{A}^{(1)}[\delta\psi^*, \delta\psi]$ explizit anzugeben. Die in den Fluktuationfelder $\delta\psi^*(\mathbf{x}, \tau)$, $\delta\psi(\mathbf{x}, \tau)$ quadratischen Beiträge in (6.45) sind von der Form

$$\mathcal{A}^{(2)}[\delta\psi^*, \delta\psi] = \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x \int d^D x' \begin{pmatrix} \delta\psi(\mathbf{x}, \tau) \\ \delta\psi^*(\mathbf{x}, \tau) \end{pmatrix}^\dagger G^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') \begin{pmatrix} \delta\psi(\mathbf{x}', \tau') \\ \delta\psi^*(\mathbf{x}', \tau') \end{pmatrix} \quad (6.48)$$

mit einer 2×2 -Matrix von Integralkernen:

$$G^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = \begin{pmatrix} G_{\psi\psi^*}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') & G_{\psi\psi}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') \\ G_{\psi^*\psi^*}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') & G_{\psi^*\psi}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') \end{pmatrix}. \quad (6.49)$$

Der erste Integralkern lautet

$$G_{\psi\psi^*}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = \delta(\tau - \tau') \left\{ \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau'} + \hat{H}(\mathbf{x}') - \mu \right] + \int d^D x'' V^{(\text{int})}(\mathbf{x}', \mathbf{x}'') \Psi^*(\mathbf{x}'', \tau'') \Psi(\mathbf{x}'', \tau'') \right\} + V^{(\text{int})}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \Psi(\mathbf{x}, \tau) \Psi^*(\mathbf{x}', \tau') \quad (6.50)$$

und entsprechend gilt

$$G_{\psi^*\psi}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = \delta(\tau - \tau') \left\{ \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \left[-\hbar \frac{\partial}{\partial \tau'} + \hat{H}(\mathbf{x}') - \mu \right] + \int d^D x'' V^{(\text{int})}(\mathbf{x}', \mathbf{x}'') \Psi^*(\mathbf{x}'', \tau'') \Psi(\mathbf{x}'', \tau'') \right\} + V^{(\text{int})}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \Psi^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi(\mathbf{x}', \tau') \quad (6.51)$$

Hierbei ist zu beachten, daß bei der Ableitung nach der Imaginärzeit eine partielle Integration durchgeführt wurde

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau \delta\psi^*(\mathbf{x}, \tau) \frac{\partial}{\partial \tau} \delta\psi(\mathbf{x}, \tau) = \left[\delta\psi^*(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi(\mathbf{x}, \tau) \right]_{\tau=0}^{\hbar\beta} - \int_0^{\hbar\beta} d\tau \delta\psi(\mathbf{x}, \tau) \frac{\partial}{\partial \tau} \delta\psi^*(\mathbf{x}, \tau), \quad (6.52)$$

bei der die Randterme aufgrund der Periodizität der Bose-Felder wegfallen. Die beiden anderen Integralkerne sind gegeben durch

$$G_{\psi\psi}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = V^{(\text{int})}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \Psi(\mathbf{x}, \tau) \Psi(\mathbf{x}', \tau') \delta(\tau - \tau'), \quad (6.53)$$

$$G_{\psi^*\psi^*}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = V^{(\text{int})}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \Psi^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi^*(\mathbf{x}', \tau') \delta(\tau - \tau'). \quad (6.54)$$

Die Terme in (6.45), die drei oder vier Fluktuationfelder $\delta\psi^*(\mathbf{x}, \tau)$, $\delta\psi(\mathbf{x}, \tau)$ enthalten, fassen wir schließlich zusammen zu

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^{(\text{cor})}[\delta\psi^*, \delta\psi] &= \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \int d^D x' V^{(\text{int})}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \left\{ \left[\Psi^*(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi(\mathbf{x}, \tau) + \delta\psi^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi(\mathbf{x}, \tau) \right] \right. \\ &\quad \left. \times \delta\psi^*(\mathbf{x}', \tau) \delta\psi(\mathbf{x}', \tau) + \frac{1}{2} \delta\psi^*(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi^*(\mathbf{x}', \tau) \delta\psi(\mathbf{x}', \tau) \right\}. \end{aligned} \quad (6.55)$$

Nun diskutieren wir, wie die einzelnen euklidischen Wirkungen in (6.46) zur effektiven Wirkung beitragen. Hierzu beachten wir, daß die großkanonische Zustandssumme (6.1) aufgrund der Zerlegung (6.43) der Bose-Felder durch ein Funktionalintegral über die Fluktuationfelder $\delta\psi^*(\mathbf{x}, \tau)$, $\delta\psi(\mathbf{x}, \tau)$ definiert ist

$$\mathcal{Z} = \oint \mathcal{D}\delta\psi^* \oint \mathcal{D}\delta\psi e^{-\mathcal{A}[\Psi^* + \delta\psi^*, \Psi + \delta\psi]/\hbar}, \quad (6.56)$$

und daß sich daraus die effektive Wirkung berechnen läßt:

$$\Gamma[\Psi^*, \Psi] = -\frac{1}{\beta} \ln \mathcal{Z}. \quad (6.57)$$

Aus (6.46), (6.47) und (6.56), (6.57) lesen wir ab, daß der führende Beitrag zur effektiven Wirkung gerade durch die ursprüngliche euklidische Wirkung (6.2)–(6.4) gegeben ist:

$$\Gamma^{(0)}[\Psi^*, \Psi] = \frac{\mathcal{A}[\Psi^*, \Psi]}{\hbar\beta}. \quad (6.58)$$

Die restlichen Beiträge zur effektiven Wirkung beschreiben demnach, wie die euklidische Wirkung (6.58) durch die Fluktuationen der Felder effektiv verändert werden. Der nächste Beitrag zur effektiven Wirkung ergibt sich nach (6.46), (6.56) und (6.57) aus dem Funktionalintegral

$$e^{-\beta\Gamma^{(1)}[\Psi^*, \Psi]} = \oint \mathcal{D}\delta\psi^* \oint \mathcal{D}\delta\psi e^{-\mathcal{A}^{(2)}[\delta\psi^*, \delta\psi]/\hbar} \quad (6.59)$$

mit der euklidischen Wirkung (6.48), die in den Fluktuationenfelder $\delta\psi^*(\mathbf{x}, \tau)$, $\delta\psi(\mathbf{x}, \tau)$ quadratisch ist. Der größeren Allgemeinheit wegen können wir anstelle von (6.59) auch gleich das erzeugende Funktional

$$\mathcal{Z}^{(2)}[j^*, j] = \oint \mathcal{D}\delta\psi^* \oint \mathcal{D}\delta\psi e^{-\mathcal{A}^{(2)}[\delta\psi^*, \delta\psi; j^*, j]/\hbar} \quad (6.60)$$

mit der euklidischen Wirkung

$$\mathcal{A}^{(2)}[\delta\psi^*, \delta\psi; j^*, j] = \mathcal{A}^{(2)}[\delta\psi^*, \delta\psi] - \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \left\{ j^*(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi(\mathbf{x}, \tau) + \delta\psi^*(\mathbf{x}, \tau) j(\mathbf{x}, \tau) \right\} \quad (6.61)$$

betrachten. Ein solches Funktionalintegral (6.48), (6.60), (6.61) wird analog zum eindimensionalen komplexen Gauß-Integral

$$I = \int d\psi^* \int d\psi \exp \left\{ -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \psi \\ \psi^* \end{pmatrix}^\dagger A \begin{pmatrix} \psi \\ \psi^* \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \eta \\ \eta^* \end{pmatrix}^\dagger \begin{pmatrix} \psi \\ \psi^* \end{pmatrix} \right\}, \quad A = \begin{pmatrix} a & b \\ b^* & a \end{pmatrix} \quad (6.62)$$

berechnet. Zerlegt man ψ^*, ψ und η^*, η in Real- und Imaginärteil gemäß (4.86), so folgt unter Beachtung von (4.88)

$$I = 2 \int_{-\infty}^{\infty} d\psi_1 \int_{-\infty}^{\infty} d\psi_2 \exp \left\{ - \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}^\dagger \tilde{A} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} - 2 \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \end{pmatrix}^\dagger \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \right\} \quad (6.63)$$

mit der Matrix

$$\tilde{A} = \begin{pmatrix} a + (b + b^*)/2 & i(b^* - b)/2 \\ i(b^* - b)/2 & a - (b + b^*)/2 \end{pmatrix}. \quad (6.64)$$

Für dieses zweidimensionale Gauß-Integral erhalten wir

$$I = \frac{2\pi}{\sqrt{\text{Det } \tilde{A}}} \exp \left\{ \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \end{pmatrix}^\dagger \tilde{A}^{-1} \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \end{pmatrix} \right\}, \quad (6.65)$$

was identisch ist mit

$$I = \frac{2\pi}{\sqrt{\text{Det } A}} \exp \left\{ \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \eta \\ \eta^* \end{pmatrix}^\dagger A^{-1} \begin{pmatrix} \eta \\ \eta^* \end{pmatrix} \right\}. \quad (6.66)$$

Demnach führt die Auswertung des Funktionalintegrales (6.48), (6.60), (6.61) auf das Ergebnis

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}^{(2)}[j^*, j] &= \exp \left\{ -\frac{1}{2} \text{Tr} \ln G^{-1} + \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x \int d^D x' \right. \\ &\quad \left. \times \begin{pmatrix} j(\mathbf{x}, \tau) \\ j^*(\mathbf{x}, \tau) \end{pmatrix}^\dagger G(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') \begin{pmatrix} j(\mathbf{x}', \tau') \\ j^*(\mathbf{x}', \tau') \end{pmatrix} \right\}. \end{aligned} \quad (6.67)$$

Hierbei ist der Tracelog analog zu (4.108) definiert durch die Summe der Logarithmen der Eigenwerte von G^{-1} :

$$\text{Tr} \ln G^{-1} = \sum_i \ln \lambda_i. \quad (6.68)$$

Dabei ist das Eigenwertproblem der 2×2 -Matrix von Integralkernen (6.49), die sogenannten Bogoliubov-de Gennes-Gleichungen, zu lösen:

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x' \begin{pmatrix} G_{\psi\psi^*}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') & G_{\psi\psi}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') \\ G_{\psi^*\psi^*}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') & G_{\psi^*\psi}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_i(\mathbf{x}', \tau') \\ v_i(\mathbf{x}', \tau') \end{pmatrix} = \lambda_i \begin{pmatrix} u_i(\mathbf{x}, \tau) \\ v_i(\mathbf{x}, \tau) \end{pmatrix}. \quad (6.69)$$

Ferner ist die Matrix $G(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau')$ der Greenschen Funktionen analog zu (4.113) als funktionale Inverse der 2×2 Matrix $G^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau')$ der Integralkerne definiert:

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau'' \int d^D x'' G^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}'', \tau'') G(\mathbf{x}'', \tau''; \mathbf{x}', \tau') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta^{(p/a)}(\tau - \tau') \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (6.70)$$

Wir wollen nun untersuchen, wie sich die einzelnen Matrixelemente von

$$G(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = \begin{pmatrix} G_{\psi\psi^*}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') & G_{\psi\psi}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') \\ G_{\psi^*\psi^*}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') & G_{\psi^*\psi}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') \end{pmatrix} \quad (6.71)$$

interpretieren lassen. Hierzu stellen wir zunächst mit Hilfe von (6.59), (6.60) und (6.67) fest, daß die gesuchte Korrektur des Baumgraphen-Resultes der effektiven Wirkung (6.58) durch den Tracelog gegeben ist:

$$\Gamma^{(1)}[\Psi^*, \Psi] = \frac{1}{2\beta} \text{Tr} \ln G^{-1}. \quad (6.72)$$

Dann definieren wir den Ensemblemittelwert

$$\langle \bullet \rangle = e^{\beta\Gamma^{(1)}[\Psi^*, \Psi]} \oint \mathcal{D}\delta\psi^* \oint \mathcal{D}\delta\psi \bullet e^{-\mathcal{A}^{(2)}[\delta\psi^*, \delta\psi]/\hbar} \quad (6.73)$$

und lesen aus (6.60), (6.61) ab:

$$\langle \delta\psi^*(\mathbf{x}_1, \tau_1) \delta\psi(\mathbf{x}_2, \tau_2) \rangle = e^{\beta\Gamma^{(1)}[\Psi^*, \Psi]} \frac{\hbar^2 \delta^2 \mathcal{Z}^{(2)}[j^*, j]}{\delta j(\mathbf{x}_1, \tau_1) \delta j^*(\mathbf{x}_2, \tau_2)} \Big|_{j=0}^{j^*=0}, \quad (6.74)$$

$$\langle \delta\psi^*(\mathbf{x}_1, \tau_1) \delta\psi^*(\mathbf{x}_2, \tau_2) \rangle = e^{\beta\Gamma^{(1)}[\Psi^*, \Psi]} \frac{\hbar^2 \delta^2 \mathcal{Z}^{(2)}[j^*, j]}{\delta j(\mathbf{x}_1, \tau_1) \delta j(\mathbf{x}_2, \tau_2)} \Big|_{j=0}^{j^*=0}, \quad (6.75)$$

$$\langle \delta\psi(\mathbf{x}_1, \tau_1) \delta\psi(\mathbf{x}_2, \tau_2) \rangle = e^{\beta\Gamma^{(1)}[\Psi^*, \Psi]} \frac{\hbar^2 \delta^2 \mathcal{Z}^{(2)}[j^*, j]}{\delta j^*(\mathbf{x}_1, \tau_1) \delta j^*(\mathbf{x}_2, \tau_2)} \Big|_{j=0}^{j^*=0}, \quad (6.76)$$

$$\langle \delta\psi(\mathbf{x}_1, \tau_1) \delta\psi^*(\mathbf{x}_2, \tau_2) \rangle = e^{\beta\Gamma^{(1)}[\Psi^*, \Psi]} \frac{\hbar^2 \delta^2 \mathcal{Z}^{(2)}[j^*, j]}{\delta j^*(\mathbf{x}_1, \tau_1) \delta j(\mathbf{x}_2, \tau_2)} \Big|_{j=0}^{j^*=0}. \quad (6.77)$$

Setzen wir hier das Ergebnis (6.67) für die großkanonische Zustandssumme $\mathcal{Z}^{(2)}[j^*, j]$ ein, so erhalten wir aus (6.74)–(6.77):

$$G(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) = \begin{pmatrix} \langle \delta\psi(\mathbf{x}_1, \tau_1) \delta\psi^*(\mathbf{x}_2, \tau_2) \rangle & \langle \delta\psi(\mathbf{x}_1, \tau_1) \delta\psi(\mathbf{x}_2, \tau_2) \rangle \\ \langle \delta\psi^*(\mathbf{x}_1, \tau_1) \delta\psi^*(\mathbf{x}_2, \tau_2) \rangle & \langle \delta\psi^*(\mathbf{x}_1, \tau_1) \delta\psi(\mathbf{x}_2, \tau_2) \rangle \end{pmatrix}. \quad (6.78)$$

Demnach lassen sich die einzelnen Matrixelemente von (6.71) als Korrelationsfunktionen interpretieren.

6.6 Bogoliubov-Theorie

Wir beobachten, daß die 2-Teilchen-Wechselwirkung (6.4) aufgrund der Eigenschaft (5.1) des Wechselwirkungspotentials $V^{(\text{int})}$ translationsinvariant ist. Demnach wird die Translationsinvarianz des Bose-Gases nur durch das 1-Teilchen-Potential $V(\mathbf{x})$ in der freien euklidischen Wirkung (2.53), (6.3) gebrochen. Es gibt nun zwei wichtige physikalische Situationen, bei denen ein homogenes Bose-Gas vorliegt. Das ist natürlich dann der Fall, wenn das 1-Teilchen-Potential verschwindet: $V(\mathbf{x}) = 0$. Eine andere Situation liegt aber vor, wenn das 1-Teilchen-Potential $V(\mathbf{x})$ räumlich periodisch ist. Ein solches 1-Teilchen-Potential läßt sich experimentell beispielsweise mit Hilfe eines optische Gitters realisieren [36]. Das Bloch-Theorem führt dann zu Energiebändern, in denen sich die Bosonen quasifrei bewegen können. Bei tiefen Temperaturen bewegen sich die Bosonen näherungsweise so, als ob sie frei wären. Beide physikalischen Situationen lassen sich dadurch beschreiben, daß man den 1-Teilchen-Hamilton-Operator

$$\hat{H}(\mathbf{x}) = \epsilon(-i\hbar\nabla) \quad (6.79)$$

verwendet. Beim verschwindenden 1-Teilchen-Potential liegt gerade die freie Dispersion

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M}, \quad (6.80)$$

und beim optischen Gitter die entsprechende Gitterdispersion des untersten Energiebandes vor.

Beim homogenen Bose-Gas ist die gesamte euklidische Wirkung (6.2)–(6.4) invariant unter Translationen im Ort und der Imaginärzeit. Es ist daher zu erwarten, daß die Background-Felder $\Psi^*(\mathbf{x}, \tau)$, $\Psi(\mathbf{x}, \tau)$ von Ort und Imaginärzeit unabhängig sind:

$$\Psi^*(\mathbf{x}, \tau) \equiv \Psi^*, \quad \Psi(\mathbf{x}, \tau) \equiv \Psi. \quad (6.81)$$

Dadurch reduziert sich die effektive Wirkung $\Gamma[\Psi^*, \Psi]$ auf das effektive Potential

$$V_{\text{eff}}(\Psi^*, \Psi) = \Gamma[\Psi^*, \Psi] \Big|_{\substack{\Psi(\mathbf{x}, \tau) \equiv \Psi \\ \Psi^*(\mathbf{x}, \tau) \equiv \Psi^*}}. \quad (6.82)$$

Aus (6.2)–(6.4) und (6.58) lesen wir dann unmittelbar den führenden Beitrag zum effektiven Potential ab:

$$V_{\text{eff}}^{(0)}(\Psi^*, \Psi) = -\mu \Psi^* \Psi V + \frac{1}{2} V^{(\text{int})}(\mathbf{k} = \mathbf{0}) \Psi^{*2} \Psi^2 V. \quad (6.83)$$

Hierbei tritt die Fourier-Transformierte (5.3) des 2-Teilchen-Wechselwirkungspotentials $V^{(\text{int})}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ auf. Um nun auch den Tracelog-Beitrag zum effektiven Potential berechnen zu können, müssen wir zunächst die Integralkerne (6.50), (6.51) und (6.53), (6.54) für das homogene Bose-Gas angeben. Wir erhalten

$$G_{\psi\psi^*}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = \delta(\tau - \tau') \left\{ \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau'} + \epsilon(-i\hbar \nabla') - \mu \right. \right. \\ \left. \left. + V^{(\text{int})}(\mathbf{k} = \mathbf{0}) \Psi^* \Psi \right] + V^{(\text{int})}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \Psi \Psi^* \right\}, \quad (6.84)$$

$$G_{\psi^*\psi}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = \delta(\tau - \tau') \left\{ \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \left[-\hbar \frac{\partial}{\partial \tau'} + \epsilon(-i\hbar \nabla') - \mu \right. \right. \\ \left. \left. + V^{(\text{int})}(\mathbf{k} = \mathbf{0}) \Psi^* \Psi \right] + V^{(\text{int})}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \Psi \Psi^* \right\} \quad (6.85)$$

und

$$G_{\psi\psi}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = V^{(\text{int})}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \Psi^2 \delta(\tau - \tau'), \quad (6.86)$$

$$G_{\psi^*\psi^*}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = V^{(\text{int})}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \Psi^{*2} \delta(\tau - \tau'). \quad (6.87)$$

Wir beobachten, daß die 2×2 -Matrix von Integralkernen (6.49) aufgrund von (5.1) nur von der Differenz der Koordinaten und der Imaginärzeit abhängt:

$$G^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = G^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}', \tau - \tau'; \mathbf{0}, 0). \quad (6.88)$$

Führt man eine Fourier-Transformation und eine Matsubara-Zerlegung durch

$$G^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_m(\tau - \tau')} G^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m), \quad (6.89)$$

so wird (6.49) auf die Fourier-Matsubara-Transformierte

$$G^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m) = \begin{pmatrix} G_{\psi\psi^*}^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m) & G_{\psi\psi}^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m) \\ G_{\psi^*\psi}^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m) & G_{\psi^*\psi^*}^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m) \end{pmatrix}. \quad (6.90)$$

zurückgeführt, deren Matrixelemente sich aus (6.84)–(6.87) ergeben:

$$G_{\psi\psi^*}^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m) = -i\hbar\omega_m + \epsilon(\mathbf{k}) - \mu + [V^{(\text{int})}(\mathbf{k} = \mathbf{0}) + V^{(\text{int})}(\mathbf{k})] \Psi^* \Psi, \quad (6.91)$$

$$G_{\psi^*\psi}^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m) = i\hbar\omega_m + \epsilon(\mathbf{k}) - \mu + [V^{(\text{int})}(\mathbf{k} = \mathbf{0}) + V^{(\text{int})}(\mathbf{k})] \Psi^* \Psi, \quad (6.92)$$

$$G_{\psi\psi}^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m) = V^{(\text{int})}(\mathbf{k}) \Psi^2, \quad (6.93)$$

$$G_{\psi^*\psi^*}^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m) = V^{(\text{int})}(\mathbf{k}) \Psi^{*2}. \quad (6.94)$$

Wir unterziehen nun auch die Lösungen der Bogoliubov-de Gennes-Gleichungen (6.69) einer Fourier-Transformation und einer Matsubara-Zerlegung:

$$\begin{pmatrix} u_i(\mathbf{x}, \tau) \\ v_i(\mathbf{x}, \tau) \end{pmatrix} = \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_m \tau} \begin{pmatrix} u_i(\mathbf{k}, \omega_m) \\ v_i(\mathbf{k}, \omega_m) \end{pmatrix}. \quad (6.95)$$

Damit gehen die Bogoliubov-de Gennes-Gleichungen (6.69) in algebraische Gleichungen über

$$\begin{pmatrix} -i\hbar\omega_m + \tilde{\epsilon}(\mathbf{k}) + V^{(\text{int})}(\mathbf{k}) \Psi^* \Psi - \lambda_i & V^{(\text{int})}(\mathbf{k}) \Psi^2 \\ V^{(\text{int})}(\mathbf{k}) \Psi^{*2} & i\hbar\omega_m + \tilde{\epsilon}(\mathbf{k}) + V^{(\text{int})}(\mathbf{k}) \Psi^* \Psi - \lambda_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_i(\mathbf{k}, \omega_m) \\ v_i(\mathbf{k}, \omega_m) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (6.96)$$

mit der Abkürzung

$$\tilde{\epsilon}(\mathbf{k}) = \epsilon(\mathbf{k}) - \mu + V^{(\text{int})}(\mathbf{k} = \mathbf{0})\Psi^*\Psi. \quad (6.97)$$

Hieraus ersehen wir, daß es für jede Matsubara-Mode m und jeden Wellenvektor \mathbf{k} genau zwei Eigenwerte $\lambda_i = \lambda_{m,\mathbf{k},\pm}$ gibt. Nach (6.68), (6.72), (6.82) lautet damit der zweite Beitrag zum effektiven Potential

$$V_{\text{eff}}^{(1)}(\Psi^*, \Psi) = \frac{V}{2\beta} \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left(\ln \lambda_{m,\mathbf{k},+} + \ln \lambda_{m,\mathbf{k},-} \right). \quad (6.98)$$

Da aber das Produkt der beiden Eigenwerte $\lambda_{m,\mathbf{k},\pm}$ die Determinante der 2×2 -Matrix $G^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m)$ ist, erhalten wir den folgenden Ausdruck für den Tracelog:

$$V_{\text{eff}}^{(1)}(\Psi^*, \Psi) = \frac{V}{2\beta} \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \ln \text{Det } G^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m). \quad (6.99)$$

Dabei ergibt sich die Determinante der Matrix (6.90) mit den Matrixelementen (6.91)–(6.94) zu

$$\text{Det } G^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m) = \hbar^2 \omega_m^2 + E(\mathbf{k})^2, \quad (6.100)$$

wobei die Dispersion

$$E(\mathbf{k}) = \sqrt{\tilde{\epsilon}(\mathbf{k})^2 + 2\tilde{\epsilon}(\mathbf{k})V^{(\text{int})}(\mathbf{k})\Psi^*\Psi} \quad (6.101)$$

auftritt. Setzt man (6.100) in (6.99) ein, so läßt sich die Matsubara-Reihe ausführen und wir erhalten

$$V_{\text{eff}}^{(1)}(\Psi^*, \Psi) = V \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{1}{\beta} \ln \sinh \beta E(\mathbf{k})/2. \quad (6.102)$$

Demnach liegt für jeden Wellenvektor \mathbf{k} ein harmonischer Oszillator mit der Frequenz $E(\mathbf{k})/\hbar$ vor, dessen freie Energie zum Tracelog (6.102) beiträgt. Man kann nun (6.102) aufspalten in

$$V_{\text{eff}}^{(1)}(\Psi^*, \Psi) = V \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left\{ \frac{E(\mathbf{k})}{2} + \frac{1}{\beta} \ln \left[1 - e^{-\beta E(\mathbf{k})} \right] \right\}. \quad (6.103)$$

Dabei stellt der erste Term den Beitrag am absoluten Temperaturnullpunkt $T = 0$ dar und der zweite Term beschreibt die Temperaturabhängigkeit des effektiven Potentials. Fassen wir (6.83) und (6.103) zusammen

$$\begin{aligned} V_{\text{eff}}(\Psi^*, \Psi) &= -\mu\Psi^*\Psi V + \frac{1}{2}V^{(\text{int})}(\mathbf{k} = \mathbf{0})\Psi^{*2}\Psi^2 V \\ &\quad + V \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left\{ \frac{E(\mathbf{k})}{2} + \frac{1}{\beta} \ln \left[1 - e^{-\beta E(\mathbf{k})} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (6.104)$$

so stellt die erste Zeile den \hbar^0 -Beitrag und die zweite Zeile den \hbar^1 -Beitrag dar. Demnach führt die Background-Methode zu einer Berechnung des effektiven Potentials in Form einer Taylor-Reihe des zweitquantisierten Planckschen Wirkungsquantums \hbar .

Betrachten wir als Spezialfall eine verschwindende 2-Teilchen-Wechselwirkung. Aus (6.97) und (6.101) folgt mit $V^{(\text{int})}(\mathbf{k}) = 0$, daß $E(\mathbf{k}) = \epsilon(\mathbf{k}) - \mu$ ist. Somit reduziert sich (6.104) auf

$$V_{\text{eff}}(\Psi^*, \Psi) = -\mu\Psi^*\Psi V + V \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left\{ \frac{\epsilon(\mathbf{k}) - \mu}{2} + \frac{1}{\beta} \ln \left[1 - e^{-\beta[\epsilon(\mathbf{k}) - \mu]} \right] \right\}. \quad (6.105)$$

Aufgrund der Veltman-Regel (6.252) entfällt in (6.104) der Beitrag der Nullpunktsschwingungen für Bose-Felder mit der freien Dispersion (6.80) und wir erhalten das effektive Potential des wechselwirkungsfreien homogenen Bose-Gases:

$$V_{\text{eff}}(\Psi^*, \Psi) = -\mu\Psi^*\Psi V + \frac{V}{\beta} \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \ln \left\{ 1 - e^{-\beta[\epsilon(\mathbf{k}) - \mu]} \right\}. \quad (6.106)$$

Mit der freien Dispersion (6.80) und der Identifikation $n_0 = \Psi^*\Psi$ geht (6.106) gerade in (4.201) über.

6.7 Kurzreichweitige Wechselwirkung

Das effektive Potential (6.97), (6.101), (6.104) des homogenen Bose-Gases wurde für eine beliebige 2-Teilchen-Wechselwirkung $V^{(\text{int})}(\mathbf{k})$ abgeleitet. Würde man auf die Yukawa- bzw. Coulomb-Wechselwirkung (5.7) bzw. (5.8) spezialisieren, so ließe sich damit die Kondensation eines geladenen Bose-Gases untersuchen [19–22]. Im folgenden wollen wir aber die Eigenschaften eines Bose-Gases behandeln, bei dem eine kurzreichweitige 2-Teilchen-Wechselwirkung vorliegt. Wie wir in Abschnitt 5.5 gesehen haben, kann man als Modell harter Kugeln das Pseudopotential

$$V^{(\text{int})}(\mathbf{x}) = g \delta(\mathbf{x}) \quad (6.107)$$

verwenden, dessen Fourier-Transformierte gegeben ist durch

$$V^{(\text{int})}(\mathbf{k}) = g. \quad (6.108)$$

Das effektive Potential (6.97), (6.101), (6.104) lautet dann

$$V_{\text{eff}}(n_0) = -\mu n_0 V + \frac{1}{2} g n_0^2 V + \eta V \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left\{ \frac{E(\mathbf{k})}{2} + \frac{1}{\beta} \ln \left[1 - e^{-\beta E(\mathbf{k})} \right] \right\} + \mathcal{O}(\eta^2) \quad (6.109)$$

mit der Dispersion

$$E(\mathbf{k}) = \sqrt{[\epsilon(\mathbf{k}) - \mu + g n_0]^2 + 2[\epsilon(\mathbf{k}) - \mu + g n_0] g n_0}, \quad (6.110)$$

wobei die Kondensatdichte $n_0 = \Psi^*\Psi$ verwendet wurde. Außerdem haben wir in (6.109) den Kleinheitsparameter η eingeführt, um formal den \hbar^0 - und den \hbar^1 -Beitrag zum effektiven Potential zu unterscheiden. Am Ende der Rechnung werden wir natürlich $\eta = 1$ setzen. Eine Extremalisierung des effektiven Potentials $V_{\text{eff}}(n_0)$ bezüglich des Backgroundes Ψ^*, Ψ führt für nicht verschwindendes Ψ^*, Ψ auf die Bedingung

$$\frac{\partial V_{\text{eff}}(n_0)}{\partial n_0} = 0. \quad (6.111)$$

Mit der Nebenrechnung

$$\frac{\partial E(\mathbf{k})}{\partial n_0} = \frac{2g[\epsilon(\mathbf{k}) - \mu] + 3g^2 n_0}{E(\mathbf{k})} \quad (6.112)$$

bestimmt sich die Kondensatdichte n_0 gemäß (6.109), (6.111) aus

$$-\mu V + gn_0 V + \eta V \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{2g[\epsilon(\mathbf{k}) - \mu] + 3g^2 n_0}{E(\mathbf{k})} \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta E(\mathbf{k})} - 1} \right\} + \mathcal{O}(\eta^2) = 0. \quad (6.113)$$

Der Ansatz

$$n_0 = n_0^{(0)} + \eta n_0^{(1)} + \mathcal{O}(\eta^2) \quad (6.114)$$

erlaubt es, (6.113) durch das Abgleichen der η -Potenzen zu lösen. Wir erhalten

$$n_0 = \frac{\mu}{g} - \eta \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{2\epsilon(\mathbf{k}) + \mu}{E(\mathbf{k})} \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta E(\mathbf{k})} - 1} \right\} + \mathcal{O}(\eta^2), \quad (6.115)$$

wobei nun die Dispersion durch

$$E(\mathbf{k}) = \sqrt{\epsilon(\mathbf{k})^2 + 2\epsilon(\mathbf{k})\mu} + \mathcal{O}(\eta) \quad (6.116)$$

gegeben ist. Werten wir das effektive Potential (6.109) am Extremum (6.115) aus, so ergibt sich die großkanonische freie Energie. Bis zur ersten Ordnung im Kleinheitsparameter η lautet sie

$$\mathcal{F} = -\frac{\mu^2}{2g} V + \eta V \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left\{ \frac{E(\mathbf{k})}{2} + \frac{1}{\beta} \ln [1 - e^{-\beta E(\mathbf{k})}] \right\} + \mathcal{O}(\eta^2). \quad (6.117)$$

Eine Differentiation nach dem chemischen Potential μ führt mit der Nebenrechnung

$$\frac{\partial E(\mathbf{k})}{\partial \mu} = \frac{\epsilon(\mathbf{k})}{E(\mathbf{k})} \quad (6.118)$$

auf die Teilchendichte

$$n = -\frac{1}{V} \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mu} = \frac{\mu}{g} - \eta \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{\epsilon(\mathbf{k})}{E(\mathbf{k})} \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta E(\mathbf{k})} - 1} \right\} + \mathcal{O}(\eta^2). \quad (6.119)$$

Wir eliminieren nun aus (6.115), (6.119) das chemische Potential μ , so daß wir eine direkte Beziehung zwischen Teilchendichte n und Kondensatdichte n_0 erhalten:

$$n = n_0 + \eta \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{\epsilon(\mathbf{k}) + gn_0}{E(\mathbf{k})} \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta E(\mathbf{k})} - 1} \right\} + \mathcal{O}(\eta^2). \quad (6.120)$$

Hierbei lautet die Dispersion

$$E(\mathbf{k}) = \sqrt{\epsilon(\mathbf{k})^2 + 2\epsilon(\mathbf{k})gn_0} + \mathcal{O}(\eta). \quad (6.121)$$

Wir beobachten, daß für kleine η Teilchen- und Kondensatdichte nur geringfügig voneinander abweichen. Daher folgt aus (6.119) die verbesserte Näherung

$$n = n_0 + \eta \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{\epsilon(\mathbf{k}) + gn}{E(\mathbf{k})} \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta E(\mathbf{k})} - 1} \right\} + \mathcal{O}(\eta^2). \quad (6.122)$$

Das Ergebnis (6.121) am absoluten Temperaturnullpunkt $T = 0$ wurde von Bogoliubov abgeleitet [31,32], die temperaturabhängigen Korrekturen stammen von Popov [33,34]. Dabei lautet aber die Dispersion nun

$$E(\mathbf{k}) = \sqrt{\epsilon(\mathbf{k})^2 + 2\epsilon(\mathbf{k})gn} + \mathcal{O}(\eta). \quad (6.123)$$

Sie wurde für die freie 1-Teilchen-Dispersion (6.80) vor kurzem experimentell gemessen [35]. In diesem Fall geht die Bogoliubov-Dispersion der Quasiteilchen (6.123) im Limes $|\mathbf{k}| \rightarrow \infty$ in die freie Dispersion über:

$$\lim_{|\mathbf{k}| \rightarrow \infty} E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M}. \quad (6.124)$$

Im langwelligen Limes $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}$ entsteht dagegen ein Phononenspektrum

$$\lim_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}} E(\mathbf{k}) = c|\mathbf{k}|\hbar \quad (6.125)$$

mit der Ausbreitungsgeschwindigkeit

$$c = \sqrt{\frac{gn}{M}}. \quad (6.126)$$

Die Entstehung des Phononenspektrums (6.125) ist eine direkte Konsequenz des Goldstone-Theorems. Danach muß eine spontan gebrochene kontinuierliche Symmetrie im langwelligen Limes $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}$ immer zu einem Phononenspektrum führen. In unserem Fall besteht die kontinuierliche Symmetrie darin, daß bei der Kondensatdichte $n_0 = \Psi^* \Psi$ die Background-Felder Ψ^*, Ψ durch $\Psi^* = \sqrt{n_0} e^{-i\varphi}$, $\Psi = \sqrt{n_0} e^{i\varphi}$ mit einer beliebigen Phase φ gegeben sind. Entsteht nun ein Bose-Kondensat, so wird eine ganz bestimmte Phase φ ausgewählt und damit die kontinuierliche $U(1)$ -Symmetrie gebrochen. Ist umgekehrt die kontinuierliche Symmetrie schon von vorneherein in der euklidischen Wirkung durch äußere Felder gebrochen, wie z.B. durch eine Laserankopplung, dann erfolgt zwar noch immer eine Kondensation des Bose-Gases. Aber die Phase φ des Kondensates stellt sich dann nicht mehr spontan ein, sondern wird von Außen erzwungen. Im Bogoliubov-Spektrum äußert sich das dadurch, daß im langwelligen Limes $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}$ statt (6.125) eine Energielücke entsteht.

Wir werten nun die Beziehung (6.122), (6.123) zwischen Teilchendichte n und Kondensatdichte n_0 am absoluten Temperaturnullpunkt $T = 0$ aus. Mit $\eta = 1$ erhalten wir zunächst

$$n = n_0 + \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{\epsilon(\mathbf{k}) + gn}{2\sqrt{\epsilon(\mathbf{k})^2 + 2\epsilon(\mathbf{k})gn}}. \quad (6.127)$$

Insbesondere werden wir auf freie Bosonen mit der 1-Teilchen-Dispersion (6.80) spezialisieren. Hierzu müssen wir überlegen, wie man ein Integral der Form

$$I = \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} f\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M}\right) \quad (6.128)$$

berechnet. Unter Ausnutzung der Rotationssymmetrie des Integranden gilt mit $k = |\mathbf{k}|$

$$I = \frac{O_D}{(2\pi)^D} \int_0^\infty dk k^{D-1} f\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2M}\right), \quad (6.129)$$

wobei O_D die Oberfläche der Einheitskugel bezeichnet. Zur Berechnung von O_D betrachten wir das D -dimensionale Gauß-Integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dx_D e^{-(x_1^2 + \dots + x_D^2)} = \pi^{D/2}. \quad (6.130)$$

Beim Volumenintegral auf der linken Seite läßt sich wieder die Rotationssymmetrie des Integranden ausnutzen:

$$O_D \int_0^{\infty} dr r^{D-1} e^{-r^2} = \pi^{D/2}. \quad (6.131)$$

Durch die Substitution $u(r) = r^2$ und das Integral (2.226) folgt dann die Oberfläche der Einheitskugel zu

$$O_D = \frac{2\pi^{D/2}}{\Gamma(D/2)}. \quad (6.132)$$

Als wichtige Spezialfälle erhalten wir

$$O_2 = 2\pi, \quad O_3 = 4\pi. \quad (6.133)$$

Einsetzen von (6.132) in (6.129) führt auf

$$I = \frac{1}{2^{D-1}\pi^{D/2}\Gamma(D/2)} \int_0^{\infty} dk k^{D-1} f\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2M}\right). \quad (6.134)$$

Durch die Substitution $\epsilon(k) = \hbar^2 k^2 / 2M$ gehen schließlich (6.128) und (6.134) über in die nützliche Integrationsformel

$$\int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} f\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M}\right) = \frac{1}{\Gamma(D/2)} \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2}\right)^{D/2} \int_0^{\infty} d\epsilon \epsilon^{D/2-1} f(\epsilon). \quad (6.135)$$

Beachten wir (6.135), so lautet (6.127):

$$n = n_0 + \frac{1}{2\Gamma(D/2)} \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2}\right)^{D/2} \left\{ \int_0^{\infty} d\epsilon \frac{\epsilon^{(D-1)/2}}{\sqrt{\epsilon + 2gn}} + gn \int_0^{\infty} d\epsilon \frac{\epsilon^{(D-3)/2}}{\sqrt{\epsilon + 2gn}} \right\}. \quad (6.136)$$

Wir beobachten, daß beide ϵ -Integrale in $D = 3$ Dimensionen UV-divergent sind. Deshalb werden wir die Methode der dimensional Regularisierung anwenden, um sie zu berechnen. Hierzu beobachten wir, daß beide ϵ -Integrale von folgender Form sind:

$$I_{\nu,\mu}(a) = \int_0^{\infty} d\epsilon \frac{\epsilon^{\nu}}{(\epsilon + a)^{\mu}}. \quad (6.137)$$

Durch dreifache Anwendung des Schwinger-Tricks (2.226) läßt sich (6.137) auswerten:

$$I_{\nu,\mu}(a) = \frac{\Gamma(\nu + 1)\Gamma(\mu - \nu - 1)}{\Gamma(\mu)a^{\mu-\nu-1}}. \quad (6.138)$$

Einsetzen von (6.137), (6.138) in (6.136) ergibt:

$$n = n_0 + \frac{(D-2)(2gn)^{D/2}}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2}\right)^{D/2} \frac{\Gamma((D-1)/2)\Gamma(-D/2)}{\Gamma(D/2)}. \quad (6.139)$$

Bei einer Spezialisierung auf $D = 3$ Raumdimensionen erhalten wir

$$n = n_0 + \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{gnM}{\hbar^2} \right)^{3/2}. \quad (6.140)$$

Mit dem Zusammenhang (5.130) zwischen Wechselwirkungsstärke g und s-Wellenstreuungslänge a ergibt dies

$$n = n_0 + \frac{8}{3\sqrt{\pi}} (an)^{3/2}. \quad (6.141)$$

Im Falle einer verschwindenden s-Wellenstreuungslänge a besagt (6.141), daß am absoluten Temperaturnullpunkt $T = 0$ alle Teilchen im Kondensat sitzen. Ist dagegen die s-Wellenstreuungslänge a von Null verschieden, so verringert sich die Kondensatdichte n_0 gemäß (6.141). Durch die repulsive 2-Teilchen-Wechselwirkung bedingt wird ein Bruchteil der Teilchen aus dem Grundzustand in einen angeregten Zustand gestreut. Diese sogenannte Entleerung (=depletion) beträgt

$$\frac{n - n_0}{n} = \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \sqrt{a^3 n}. \quad (6.142)$$

Man kann sich nun die Frage stellen, welche Situation bei einer immer größeren s-Wellenstreuungslänge a entsteht. Wächst a immer mehr an, so verschwindet die Kondensatdichte nach (6.142) beim kritischen Wert

$$a_c n^{1/3} = \left(\frac{9\pi}{64} \right)^{1/3} \approx 0.762. \quad (6.143)$$

Es ist in der Literatur umstritten, ob das homogene Bose-Gas einen solchen Quantenphasenübergang zeigt [37].

6.8 Zeitunabhängige Gross-Pitaevskii-Gleichung

Wir untersuchen nun die Eigenschaften des Kondensates am absoluten Temperaturnullpunkt in einer Falle. Hierbei beschränken wir unsere Diskussion darauf, die Konsequenzen des führenden Beitrages zur effektiven Wirkung (6.58) zu studieren. Die Extremalisierung der effektiven Wirkung gemäß (4.175) führt mit (6.58) auf

$$\frac{\delta \mathcal{A}[\Psi^*, \Psi]}{\delta \Psi^*(\mathbf{x}, \tau)} = 0. \quad (6.144)$$

Mit Hilfe der euklidischen Wirkung (6.2)–(6.4) und des 1-Teilchen-Hamilton-Operators (2.53) erhalten wir

$$\left\{ \hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta + V(\mathbf{x}) - \mu + \int d^D x' V^{(\text{int})}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \Psi^*(\mathbf{x}', \tau) \Psi(\mathbf{x}', \tau) \right\} \Psi(\mathbf{x}, \tau) = 0. \quad (6.145)$$

Aufgrund der Translationsinvarianz bezüglich der Imaginärzeit erwarten wir, daß die extremalen Background-Felder nicht von der Imaginärzeit abhängen:

$$\Psi^*(\mathbf{x}, \tau) = \Psi^*(\mathbf{x}), \quad \Psi(\mathbf{x}, \tau) = \Psi(\mathbf{x}). \quad (6.146)$$

Daher vereinfacht sich (6.145) zu

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + V(\mathbf{x}) - \mu + \int d^D x' V^{(\text{int})}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \Psi^*(\mathbf{x}') \Psi(\mathbf{x}') \right\} \Psi(\mathbf{x}) = 0. \quad (6.147)$$

Diese zeitunabhängige Gross-Pitaevskii-Gleichung für die Kondensatwellenfunktion $\Psi(\mathbf{x})$ stellt eine nichtlineare Schrödinger-Gleichung dar. Sie beinhaltet drei verschiedene Energiebeiträge. Neben der kinetischen Energie und der potentiellen Energie der Falle tritt noch eine Wechselwirkungsenergie auf, die durch eine Mittelung über die gesamte Kondensatwellenfunktion entsteht. Deshalb handelt es sich im allgemeinen bei (6.147) um eine partielle Integrodifferentialgleichung.

Hat man die Gross-Pitaevskii-Gleichung (6.147) gelöst, so hängt die Kondensatwellenfunktion $\Psi(\mathbf{x})$ noch vom chemischen Potential μ ab. Letzteres wird erst durch die Normierungsbedingung

$$\int d^D x |\Psi(\mathbf{x})|^2 = N_0 \quad (6.148)$$

festgelegt, wobei N_0 die Zahl der kondensierten Bosonen bezeichnet. Wir zeigen nun, daß unsere Beschränkung auf den führenden Beitrag zur effektiven Wirkung (6.58) eine wichtige Konsequenz für N_0 hat. Hierzu werten wir (6.58) mit (6.2)–(6.4) für die extremalen Background-Felder aus (6.146) aus und erhalten dadurch die großkanonische freie Energie

$$\begin{aligned} \mathcal{F} &= \int d^D x \Psi^*(\mathbf{x}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + V(\mathbf{x}) - \mu \right\} \Psi(\mathbf{x}) \\ &\quad + \frac{1}{2} \int d^D x \int d^D x' V^{(\text{int})}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \Psi^*(\mathbf{x}') \Psi(\mathbf{x}') \Psi^*(\mathbf{x}) \Psi(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (6.149)$$

Wir berechnen nun mit Hilfe von (1.37) die Teilchenzahl und beachten dabei, daß $\Psi^*(\mathbf{x})$, $\Psi(\mathbf{x})$ als Lösung der Gross-Pitaevskii-Gleichung (6.147) noch implizit vom chemischen Potential μ abhängen:

$$\begin{aligned} N &= \int d^D x |\Psi(\mathbf{x})|^2 \\ &\quad - \int d^D x \frac{\partial \Psi^*(\mathbf{x})}{\partial \mu} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + V(\mathbf{x}) - \mu + \int d^D x' V^{(\text{int})}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \Psi^*(\mathbf{x}') \Psi(\mathbf{x}') \right\} \Psi(\mathbf{x}) \\ &\quad - \int d^D x \Psi^*(\mathbf{x}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + V(\mathbf{x}) - \mu + \int d^D x' V^{(\text{int})}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \Psi^*(\mathbf{x}') \Psi(\mathbf{x}') \right\} \frac{\partial \Psi(\mathbf{x})}{\partial \mu}. \end{aligned} \quad (6.150)$$

Da nun aber $\Psi^*(\mathbf{x})$, $\Psi(\mathbf{x})$ die Gross-Pitaevskii-Gleichung (6.147) erfüllen, reduziert sich (6.150) auf

$$N = \int d^D x |\Psi(\mathbf{x})|^2. \quad (6.151)$$

Der Vergleich von (6.148) und (6.151) zeigt, daß im Rahmen unserer Näherung Teilchenzahl N und Kondensatzahl N_0 übereinstimmen:

$$N = N_0. \quad (6.152)$$

Hätte man bei der effektiven Wirkung neben dem führenden Beitrag (6.58) auch noch den Tracelog-Beitrag (6.72) berücksichtigt, so hätte man auch bei Anwesenheit einer Falle den Effekt der Entleerung des Grundzustandes durch die 2-Teilchen-Wechselwirkung untersuchen können. Hierzu hätte man aber die Gross-Pitaevskii-Gleichung (6.147) durch einen entsprechenden Term vom Tracelog erweitern müssen.

Im folgenden wollen wir uns aufgrund der experimentellen Relevanz auf eine kurzreichweitige δ -Wechselwirkung beschränken:

$$V^{(\text{int})}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = g \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (6.153)$$

Dadurch reduziert sich die partielle Integrodifferentialgleichung (6.147) auf eine nichtlineare partielle Differentialgleichung:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + V(\mathbf{x}) - \mu + g|\Psi(\mathbf{x})|^2 \right\} \Psi(\mathbf{x}) = 0. \quad (6.154)$$

6.9 Qualitative Energetische Abschätzungen

Bevor wir explizite Lösungen der Gross-Pitaevskii-Gleichung (6.154) diskutieren, wollen wir die Relevanz der einzelnen Energiebeiträge qualitativ abschätzen. Hierzu reicht es aus, wenn wir unsere Überlegungen auf eine isotrope Falle $V(\mathbf{x}) = M\omega^2|\mathbf{x}|^2/2$ beschränken. Wir betrachten zunächst den Fall, daß keine Wechselwirkung zwischen den Bosonen vorliegt. Besitzt die Kondensatwolke die mittlere Ausdehnung L , so lautet deren potentielle Energie

$$E_{\text{pot}}(L) = \frac{M}{2} \omega^2 L^2. \quad (6.155)$$

Durch die Heisenbergsche Unschärferelation führt eine mittlere Ausdehnung L zu einem mittleren Impuls $p = \hbar/L$. Die kinetische Energie der Kondensatwolke ist damit gegeben durch

$$E_{\text{kin}}(L) = \frac{\hbar^2}{2ML^2}. \quad (6.156)$$

Die Gesamtenergie

$$E_{\text{ges}}(L) = E_{\text{pot}}(L) + E_{\text{kin}}(L) \quad (6.157)$$

wird dann zu einer Funktion der mittleren Ausdehnung L , die an der Stelle

$$L_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega}} \quad (6.158)$$

ein Minimum aufweist. Bei der Länge (6.158) handelt es sich gerade um die typische quantenmechanische Längenskala des isotropen harmonischen Oszillators. Dessen Grundzustandswellenfunktion lautet nämlich

$$\psi_0(\mathbf{x}) = \frac{1}{\pi^{D/4} L_0^{D/2}} \exp \left\{ -\frac{\mathbf{x}^2}{2L_0^2} \right\}. \quad (6.159)$$

Anschließend wollen wir den Einfluß einer repulsiven Wechselwirkung $g > 0$ diskutieren. Da eine Kondensatwolke der mittleren Ausdehnung L die Teilchendichte $n = N/L^3$ besitzt, ist die Wechselwirkungsenergie von der Größenordnung

$$E_{\text{int}}(L) = \frac{gN}{L^3}. \quad (6.160)$$

Wir sehen uns nun an, welche Energiebeiträge zur Gesamtenergie

$$E_{\text{ges}}(L) = E_{\text{pot}}(L) + E_{\text{kin}}(L) + E_{\text{int}}(L) \quad (6.161)$$

bei welcher Längenskala von Bedeutung sind. Bei großen Kondensatwolken gilt offensichtlich

$$E_{\text{pot}}(L) \gg E_{\text{kin}}(L), E_{\text{int}}(L), \quad L \rightarrow \infty, \quad (6.162)$$

während bei kleinen Kondensatwolken die Situation

$$E_{\text{int}}(L) \gg E_{\text{kin}}(L), E_{\text{pot}}(L), \quad L \rightarrow 0 \quad (6.163)$$

vorliegt. Aus (6.162) und (6.163) lesen wir ab, daß für alle Längenskalen L die kinetische Energie $E_{\text{kin}}(L)$ vernachlässigbar ist. Deshalb reduziert sich die Gesamtenergie (6.161) mit Hilfe von (6.155) und (6.160) in führender Ordnung auf

$$E_{\text{ges}}(L) = \frac{M}{2} \omega^2 L^2 + \frac{gN}{L^3}. \quad (6.164)$$

Sie besitzt ein Minimum an der Stelle

$$L_{\text{min}} = \left(\frac{3gN}{M\omega^2} \right)^{1/5}, \quad (6.165)$$

die aufgrund von (5.130) und (6.158) von der Form

$$L_{\text{min}} = \left(\frac{12\pi aN}{L_0} \right)^{1/5} L_0, \quad (6.166)$$

ist. Hierbei tritt als typisches Maß der Wechselwirkung die dimensionslose Größe

$$\alpha = \left(\frac{aN}{L_0} \right)^{1/5} \quad (6.167)$$

auf. Bei einer s-Wellenstrelänge von $a \approx 10$ nm, einer Ausdehnung der Kondensatwolke von $L_0 \approx 1 \mu\text{m}$ und einer Teilchenzahl von $N \approx 10^5$ ergibt sich diese Größe (6.167) zu

$$\alpha \approx 4. \quad (6.168)$$

Aus (6.166)–(6.168) lesen wir dann $L_{\text{min}} > L_0$ ab. Das bedeutet, daß eine repulsive Wechselwirkung $g > 0$ tendenziell die Ausdehnung der Kondensatwolke vergrößert. Im folgenden werden wir diese qualitativen energetischen Abschätzungen durch explizite Rechnungen verbessern.

6.10 Variationsverfahren

Wir untersuchen nun die Lösung der Gross-Pitaevskii-Gleichung (6.154) im Falle einer anisotropen harmonischen Falle (2.213). Verschwindet die 2-Teilchen-Wechselwirkung, gilt also $g = 0$, dann wird (6.154) gelöst durch die Gauß-Funktion

$$\Psi(\mathbf{x}) = C \exp \left\{ - \sum_{i=1}^D \frac{x_i^2}{2L_i^2} \right\}. \quad (6.169)$$

mit den Oszillatorlängen

$$L_i = \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega_i}}. \quad (6.170)$$

Eine Normierung der Kondensatwellenfunktion (6.169) gemäß (6.151) führt auf die Konstante

$$C = \frac{N^{1/2}}{\pi^{D/4} \tilde{L}^{D/2}}, \quad (6.171)$$

wobei \tilde{L} das geometrische Mittel der Oszillatorlängen (6.170) darstellt:

$$\tilde{L} = \sqrt{\frac{\hbar}{M\tilde{\omega}}}. \quad (6.172)$$

Wir nehmen nun an, daß die Kondensatwellenfunktion $\Psi(\mathbf{x})$ auch bei einer nichtverschwindenden 2-Teilchen-Wechselwirkung eine Gauß-Funktion darstellt:

$$\Psi(\mathbf{x}) = \frac{N^{1/2}}{\pi^{D/4} \tilde{A}^{D/2}} \exp \left\{ - \sum_{i=1}^D \frac{x_i^2}{2A_i^2} \right\}. \quad (6.173)$$

Hierbei haben wir die Längen A_i eingeführt, die wir im folgenden als Variationsparameter auffassen wollen. Vernachlässigen wir die kinetische Energie, dann setzt sich die Gesamtenergie der Grundzustandswellenfunktion $\Psi(\mathbf{x})$ aus zwei Energiebeiträgen zusammen:

$$E_0 = E_{\text{pot}} + E_{\text{int}}. \quad (6.174)$$

Für die potentielle Energie

$$E_{\text{pot}} = \int d^D x V(\mathbf{x}) |\Psi(\mathbf{x})|^2 \quad (6.175)$$

erhalten wir mit (2.213) und (6.173):

$$E_{\text{pot}} = \frac{N}{\pi^{D/2} \tilde{A}^D} \int d^D x \left(\sum_{i=1}^D \frac{M}{2} \omega_i^2 x_i^2 \right) \exp \left\{ - \sum_{i=1}^D \frac{x_i^2}{A_i^2} \right\}. \quad (6.176)$$

Die Ausführung des Gaußschen Integrales ergibt mit (6.172):

$$E_{\text{pot}} = N \sum_{i=1}^D \frac{\hbar\omega_i A_i^2}{4L_i^2}. \quad (6.177)$$

Entsprechend erhalten wir für die Wechselwirkungsenergie

$$E_{\text{int}} = \frac{g}{2} \int d^D x |\Psi(\mathbf{x})|^4 \quad (6.178)$$

das Ergebnis

$$E_{\text{int}} = \frac{gN^2}{2(2\pi)^{D/2} \tilde{A}^D}. \quad (6.179)$$

Es bietet sich an, die dimensionslosen Längen

$$\alpha_i = \frac{A_i}{L_i} \quad (6.180)$$

einzuführen und diese als Variationsparameter aufzufassen. Die Grundzustandsenergie (6.174) lautet dann mit (6.177) und (6.179):

$$E_0 = \frac{N}{4} \sum_{i=1}^D \hbar\omega_i \alpha_i^2 + \frac{gN^2}{2(2\pi)^{D/2} \tilde{L}^D \tilde{\alpha}^D}. \quad (6.181)$$

Eine Extremalisierung der Grundzustandsenergie (6.181) bezüglich der Variationsparameter α_i führt auf

$$\frac{\partial E_0}{\partial \alpha_i} = \frac{N}{2} \hbar\omega_i \alpha_i - \frac{gN^2}{2(2\pi)^{D/2} \tilde{L}^D \tilde{\alpha}^D \alpha_i} = 0. \quad (6.182)$$

Aus (6.182) erhalten wir für die Variationsparameter

$$\alpha_i^2 = \frac{gN}{(2\pi)^{D/2} \tilde{L}^D \tilde{\alpha}^D \hbar\omega_i}, \quad (6.183)$$

so daß deren geometrisches Mittel gegeben ist durch

$$\tilde{\alpha}^{D+2} = \frac{gN}{(2\pi)^{D/2} \tilde{L}^D \hbar\tilde{\omega}}. \quad (6.184)$$

In $D = 3$ Raumdimensionen lautet das geometrische Mittel der Variationsparameter aufgrund von (5.130) beispielsweise

$$\tilde{\alpha} = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/10} \left(\frac{aN}{\tilde{L}}\right)^{1/5}. \quad (6.185)$$

Aus (6.183), (6.184) ergeben sich die Variationsparameter zu

$$\alpha_i = \sqrt{\frac{\tilde{\omega}}{\omega_i}} \tilde{\alpha}. \quad (6.186)$$

Einsetzen von (6.186) in (6.177), (6.180) führt auf die potentielle Energie

$$E_{\text{pot}} = \frac{D}{4} \hbar\tilde{\omega} \tilde{\alpha}^2 N. \quad (6.187)$$

Entsprechend erhalten wir für die Wechselwirkungsenergie (6.179):

$$E_{\text{int}} = \frac{1}{2} \hbar \tilde{\omega} \tilde{\alpha}^2 N. \quad (6.188)$$

Das Verhältnis von Wechselwirkungsenergie (6.188) und potentieller Energie (6.187) ist gegeben durch

$$\frac{E_{\text{int}}}{E_{\text{pot}}} = \frac{2}{D}, \quad (6.189)$$

und die Grundzustandsenergie (6.174) lautet:

$$E_0 = \frac{D+2}{4} \hbar \tilde{\omega} \tilde{\alpha}^2 N. \quad (6.190)$$

In $D = 3$ Raumdimensionen lesen wir aus (6.185) und (6.190) ab:

$$E_0 = \frac{5}{4} \left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/5} \hbar \tilde{\omega} \left(\frac{aN}{\tilde{L}} \right)^{2/5} N. \quad (6.191)$$

Außerdem stehen potentielle Energie (6.187) und Wechselwirkungsenergie (6.188) folgendermaßen in Beziehung zur Grundzustandsenergie (6.190):

$$E_{\text{pot}} = \frac{D}{D+2} E_0, \quad (6.192)$$

$$E_{\text{int}} = \frac{2}{D+2} E_0, \quad (6.193)$$

6.11 Thomas-Fermi-Näherung

Wie wir durch unsere energetischen Abschätzungen im Abschnitt 6.9 gesehen haben, kann der Term der kinetischen Energie in der Gross-Pitaevskii-Gleichung (6.154) näherungsweise vernachlässigt werden. Im Rahmen dieser sogenannten Thomas-Fermi-Näherung reduziert sich die partielle Differentialgleichung (6.154) auf eine rein algebraische Gleichung für die Kondensatwellenfunktion. Hierbei ist $\Psi(\mathbf{x})$ gegeben durch

$$|\Psi(\mathbf{x})|^2 = \frac{\mu - V(\mathbf{x})}{g} \quad (6.194)$$

für alle \mathbf{x} , für die die rechte Seite nicht negativ ist. Für alle anderen Orte verschwindet die Kondensatwellenfunktion $\Psi(\mathbf{x})$. Liegt beispielsweise als 1-Teilchen-Potential $V(\mathbf{x})$ eine anisotrope harmonische Falle (2.213) vor, so dehnt sich $\Psi(\mathbf{x})$ in allen Richtungen bis zu den Halbachsen R_i aus, die gegeben sind durch

$$\frac{M}{2} \omega_i^2 R_i^2 = \mu \quad \Rightarrow \quad R_i = \sqrt{\frac{2\mu}{M\omega_i^2}}. \quad (6.195)$$

Ein Maß für die räumliche Ausdehnung des Kondensates ist dann das geometrische Mittel \tilde{R} dieser Halbachsen R_i

$$\tilde{R} = \sqrt{\frac{2\mu}{M\tilde{\omega}^2}}. \quad (6.196)$$

Es liegt fest, wenn das chemische Potential μ bekannt ist. Wir bestimmen μ mit Hilfe der Normierungsbedingung (6.151) unter Beachtung von (2.213) und (6.194):

$$N = \frac{1}{g} \int d^D x \left\{ \mu - \sum_{i=1}^D \frac{M}{2} \omega_i^2 x_i^2 \right\}. \quad (6.197)$$

Dabei erzwingt die Forderung, daß das Betragsquadrat der Kondensatwellenfunktion (6.194) positiv ist, daß sich die Integration in (6.197) in einem Ellipsoid erstreckt:

$$\sum_{i=1}^D \frac{M}{2} \omega_i^2 x_i^2 \leq \mu. \quad (6.198)$$

Durch die Substitution $y_i = \sqrt{M\omega_i^2/2\mu} x_i$ wird dieses Ellipsoid zu einer Einheitskugel deformiert:

$$\sum_{i=1}^D y_i^2 \leq 1. \quad (6.199)$$

Das bedeutet, daß wir im transformierten Integral

$$N = \left(\frac{2\mu}{M} \right)^{D/2} \frac{\mu}{g\tilde{\omega}^D} \int d^D y (1 - \mathbf{y}^2) \quad (6.200)$$

zu Kugelkoordinaten übergehen können:

$$N = \left(\frac{2\mu}{M} \right)^{D/2} \frac{\mu O_D}{g\tilde{\omega}^D} \int_0^1 d\rho \rho^{D-1} (1 - \rho^2). \quad (6.201)$$

Hierbei bezeichnet O_D die Oberfläche der Einheitskugel. Die Auswertung des elementaren Integrales (6.201) ergibt dann

$$N = \left(\frac{2\mu}{M} \right)^{D/2} \frac{2O_D \mu}{D(D+2)g\tilde{\omega}^D}. \quad (6.202)$$

Im Falle von $D = 3$ Raumdimensionen erhalten wir hieraus unter Beachtung von (5.130) und (6.133):

$$\mu = \frac{15^{2/5}}{2} \left(\frac{aN}{\tilde{L}} \right)^{2/5} \hbar\tilde{\omega}. \quad (6.203)$$

Einsetzen von (6.203) in (6.196) führt auf den sogenannten Thomas-Fermi-Radius

$$\tilde{R} = 15^{1/5} \left(\frac{aN}{\tilde{L}} \right)^{1/5} \tilde{L}, \quad (6.204)$$

der in der Regel größer als die mittlere Ausdehnung der wechselwirkungsfreien Grundzustandswellenfunktion im anisotropen harmonischen Oszillator (6.172) ist. Wir beobachten, daß durch Elimination der Teilchenzahl N die Energieskala (6.203) und die Längenskala (6.204) zueinander in Beziehung stehen:

$$\mu = \frac{\tilde{R}^2}{2\tilde{L}^2} \hbar\tilde{\omega}. \quad (6.205)$$

Im Falle einer isotropen harmonischen Oszillators $\omega_1 = \dots = \omega_D = \omega$ mit $\tilde{L} = L$ und $\tilde{R} = R$ folgt daher für die Teilchendichte (6.194):

$$|\Psi(\mathbf{x})|^2 = \frac{R^2}{8\pi L^4 a} \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right]. \quad (6.206)$$

Hierbei haben wir nochmals (5.130) und (6.172) berücksichtigt. Außerdem stellen wir mit Hilfe von (6.170) und (6.205) fest, daß

$$\mu = \frac{1}{2} M \omega^2 R^2 = V(R) \quad (6.207)$$

gilt, d.h. das chemische Potential stimmt mit dem Potentialwert am Thomas-Fermi-Radius R überein.

Wir wollen nun noch einige energetische Überlegungen in D Raumdimensionen anstellen. Zunächst beobachten wir, daß am absoluten Temperaturnullpunkt $T = 0$ die innere Energie U mit der Grundzustandsenergie E_0 übereinstimmt, da gemäß (6.152) alle Teilchen im Grundzustand sitzen. Aus der thermodynamischen Beziehung (1.16) lesen wir dann ab:

$$\mu = \frac{\partial E_0}{\partial N}. \quad (6.208)$$

Da die Abhängigkeit des chemischen Potentials μ von der Teilchenzahl N gemäß (6.202) bekannt ist, können wir durch Integration von (6.208) die Grundzustandsenergie berechnen und erhalten:

$$E_0 = \frac{D+2}{D+4} \mu N. \quad (6.209)$$

Demnach ist das chemische Potential μ ein Maß für die Grundzustandsenergie. Außerdem können wir uns fragen, wie sich diese Grundzustandsenergie gemäß (6.174) auf die potentielle Energie und die Wechselwirkungsenergie verteilt. Für die potentielle Energie (6.175) der Kondensatwellenfunktion erhalten wir mit (6.194) und der Substitution $y_i = \sqrt{M\omega_i^2/2\mu} x_i$:

$$E_{\text{pot}} = \left(\frac{2\mu}{M} \right)^{D/2} \frac{\mu^2}{g\tilde{\omega}^D} \int d^D y \mathbf{y}^2 (1 - \mathbf{y}^2), \quad (6.210)$$

wobei die Einschränkung (6.199) zu beachten ist. Durch den Übergang zu Kugelkoordinaten geht (6.210) über in

$$E_{\text{pot}} = \left(\frac{2\mu}{M} \right)^{D/2} \frac{\mu^2 O_D}{g\tilde{\omega}^D} \int_0^1 d\rho \rho^{D+1} (1 - \rho^2), \quad (6.211)$$

wobei die elementare Integration ergibt:

$$E_{\text{pot}} = \frac{2O_D \mu^2}{(D+2)(D+4)g\tilde{\omega}^D} \left(\frac{2\mu}{M} \right)^{D/2}. \quad (6.212)$$

Durch Verwendung von (6.202) und (6.209) reduziert sich (6.212) auf

$$E_{\text{pot}} = \frac{D}{(D+2)} E_0, \quad (6.213)$$

so daß sich ebenfalls die Beziehung (6.192) ergibt. Aus (6.174) lesen wir dann ab

$$E_{\text{int}} = \frac{2}{(D+2)} E_0, \quad (6.214)$$

so daß sich wieder dasselbe Verhältnis (6.189) von Wechselwirkungsenergie und potentieller Energie ergibt. Wir stellen aber fest, daß die in der Variationsrechnung und in der Thomas-Fermi-Näherung erzielten Resultate für die Grundzustandsenergie voneinander abweichen. Der Vergleich von (6.191) mit (6.203), (6.209) zeigt, daß die Variationsrechnung die Grundzustandsenergie der Thomas-Fermi-Näherung bis auf 8 % genau beschreibt:

$$\frac{E_0^{\text{TF}}}{E_0^{\text{V}}} = \frac{(3600\pi)^{1/5}}{7} \approx 0.92. \quad (6.215)$$

Abschließend bemerken wir, daß die hier vorgestellte Thomas-Fermi-Näherung für die Teilchendichte am Rande der Kondensatwolke zusammenbricht. Dort ist der Gradient der Teilchendichte so groß, daß deren kinetische Energie nicht mehr vernachlässigt werden kann [5].

6.12 Thomas-Fermi-Bogoliubov-Theorie

Im vorherigen Abschnitt haben wir die Thomas-Fermi-Näherung der Gross-Pitaevskii-Gleichung (6.154) besprochen. Sie beruht darauf, den Term der kinetischen Energie in (6.154) zu vernachlässigen. Nun werden wir diese Überlegungen zu einer Thomas-Fermi-Näherung der Bogoliubov-Theorie erweitern [38,39]. Dabei werden wir sehen, daß die Thomas-Fermi-Näherung im wesentlichen einer semiklassischen Näherung entspricht. Um ein tieferes physikalisches Verständnis für diese semiklassische Näherung zu gewinnen, werden wir zunächst das Vorgehen bei nichtwechselwirkenden Quantengasen in Abschnitt 4.11 wiederholen. Die großkanonische freie Energie ist durch (4.13) gegeben, wobei die 1-Teilchen-Energien $E_{\mathbf{n}}$ Lösungen des Eigenwertproblems (2.62) des 1-Teilchen-Hamilton-Operators (2.53) darstellen. Verschwindet das 1-Teilchen-Potential $V(\mathbf{x})$, liegt also ein homogenes Quantengas vor, so lautet die großkanonische freie Energie im thermodynamischen Limes eines unendlich großen Kastens:

$$\mathcal{F} = \frac{\epsilon}{\beta} \int d^D x \int \frac{d^D p}{(2\pi\hbar)^D} \ln \left\{ 1 - \epsilon e^{-\beta[\mathbf{p}^2/2M - \mu]} \right\}. \quad (6.216)$$

Im Falle eines nicht verschwindenden 1-Teilchen-Potentials $V(\mathbf{x})$ ist dagegen die großkanonische freie Energie in führender semiklassischer Näherung durch (2.9), (4.160) gegeben:

$$\mathcal{F} = \frac{\epsilon}{\beta} \int d^D x \int \frac{d^D p}{(2\pi\hbar)^D} \ln \left\{ 1 - \epsilon e^{-\beta[\mathbf{p}^2/2M + V(\mathbf{x}) - \mu]} \right\}. \quad (6.217)$$

Der Vergleich von (6.216) und (6.217) zeigt, daß die semiklassische Näherung darauf beruht, das chemische Potential μ durch $\mu - V(\mathbf{x})$ zu ersetzen:

$$\mu \quad \rightarrow \quad \mu - V(\mathbf{x}). \quad (6.218)$$

Die Substitution macht nur dann Sinn, wenn das 1-Teilchen-Potential $V(\mathbf{x})$ nur schwach ortsabhängig ist und somit ein quasihomogenes Quantengas vorliegt.

Nun verallgemeinern wir diese heuristischen Überlegungen auf die Bogoliubov-Theorie schwach wechselwirkender Bose-Gase. In Abschnitt 6.7 haben wir das homogene Bose-Gas mit kurzreichweitiger δ -Wechselwirkung diskutiert. Dabei ist das effektive Potential V_{eff} gemäß (6.109) eine Funktion der homogenen Kondensatdichte n_0 :

$$V_{\text{eff}}(n_0) = \int d^D x \left\{ -\mu n_0 + \frac{1}{2} g n_0^2 + \eta \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left[\frac{E(\mathbf{k})}{2} + \frac{1}{\beta} \ln \left(1 - e^{-\beta E(\mathbf{k})} \right) \right] + \mathcal{O}(\eta^2) \right\}, \quad (6.219)$$

wobei die Dispersion durch (6.110) gegeben ist. Wenn wir nun ein schwach räumlich veränderliches 1-Teilchen-Potential $V(\mathbf{x})$ vorliegen haben, so läßt sich dessen Einfluß auf die thermodynamischen Eigenschaften im Rahmen der Thomas-Fermi-Näherung dadurch beschreiben, daß man die Substitution (6.218) in (6.110), (6.219) vornimmt. Dabei ist allerdings zu beachten, daß im Rahmen der Thomas-Fermi-Näherung zusätzlich noch die homogene Kondensatdichte n_0 schwach räumlich moduliert wird. Deshalb ist beim Übergang vom homogenen zum quasihomogenen Bose-Gas die Substitution (6.218) zu ergänzen durch

$$n_0 \rightarrow n_0(\mathbf{x}). \quad (6.220)$$

Die Substitutionen (6.218), (6.220) der Thomas-Fermi-Näherung werden häufig auch als lokale Dichte-Näherung bezeichnet. Damit wird das effektive Potential V_{eff} ein Funktional der Kondensatdichte $n_0(\mathbf{x})$

$$V_{\text{eff}}[n_0] = \int d^D x \left\{ [V(\mathbf{x}) - \mu] n_0(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} g n_0(\mathbf{x})^2 + \eta \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left[\frac{E(\mathbf{k}, \mathbf{x})}{2} + \frac{1}{\beta} \ln \left(1 - e^{-\beta E(\mathbf{k}, \mathbf{x})} \right) \right] + \mathcal{O}(\eta^2) \right\} \quad (6.221)$$

mit der räumlich modulierten Bogoliubov-Dispersion

$$E(\mathbf{k}, \mathbf{x}) = \sqrt{[\epsilon(\mathbf{k}) + V(\mathbf{x}) - \mu + g n_0(\mathbf{x})]^2 + 2[\epsilon(\mathbf{k}) + V(\mathbf{x}) - \mu + g n_0(\mathbf{x})] g n_0(\mathbf{x})}. \quad (6.222)$$

Zunächst spezialisieren wir diese Thomas-Fermi-Näherung auf eine verschwindende 2-Teilchen-Wechselwirkung. Unter Berücksichtigung der freien Dispersion (6.80) und der Veltman-Regel (6.252) erhalten wir

$$V_{\text{eff}}[n_0] = \int d^D x \left\{ [V(\mathbf{x}) - \mu] n_0(\mathbf{x}) + \frac{\eta}{\beta} \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \ln \left[1 - e^{-\beta E(\mathbf{k}, \mathbf{x})} \right] + \mathcal{O}(\eta^2) \right\} \quad (6.223)$$

mit der Dispersion

$$E(\mathbf{k}, \mathbf{x}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} + V(\mathbf{x}) - \mu. \quad (6.224)$$

Durch den Vergleich von (4.198) mit (6.223), (6.224) erkennen wir einen wesentlichen Unterschied zwischen der früheren semiklassischen Näherung und der jetzigen Thomas-Fermi-Näherung. Während man in (4.198) die exakte Grundzustandswellenfunktion verwendet, wird sie in

(6.223) nur im Rahmen der lokalen Dichte-Naherung berucktigt. Beide Naherungen (4.198) und (6.223) behandeln aber die thermisch angeregten Bosonen auf dieselbe Weise.

Wir kehren nun wieder zur Thomas-Fermi-Bogoliubov-Theorie (6.221), (6.222) zuruck und bestimmen die Kondensatdichte $n_0(\mathbf{x})$ durch Extremalisierung des effektiven Potentials:

$$\frac{\delta V_{\text{eff}}[n_0]}{\delta n_0(\mathbf{x})} = 0. \quad (6.225)$$

Mit der Nebenrechnung

$$\frac{\partial E(\mathbf{k}, \mathbf{x})}{\partial n_0(\mathbf{x})} = \frac{2g[\epsilon(\mathbf{k}) + V(\mathbf{x}) - \mu] + 3g^2 n_0(\mathbf{x})}{E(\mathbf{k}, \mathbf{x})} \quad (6.226)$$

geht (6.225) uber in

$$\begin{aligned} V(\mathbf{x}) - \mu + gn_0(\mathbf{x}) + \eta \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{2g[\epsilon(\mathbf{k}) + V(\mathbf{x}) - \mu] + 3g^2 n_0(\mathbf{x})}{E(\mathbf{k}, \mathbf{x})} \\ \times \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta E(\mathbf{k}, \mathbf{x})} - 1} \right\} + \mathcal{O}(\eta^2) = 0. \end{aligned} \quad (6.227)$$

Bis zur ersten Ordnung in η folgt hieraus die Kondensatdichte zu

$$n_0(\mathbf{x}) = \frac{\mu - V(\mathbf{x})}{g} - \eta \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{2\epsilon(\mathbf{k}) + \mu - V(\mathbf{x})}{E(\mathbf{k}, \mathbf{x})} \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta E(\mathbf{k}, \mathbf{x})} - 1} \right\} + \mathcal{O}(\eta^2), \quad (6.228)$$

wobei die Dispersion gegeben ist durch

$$E(\mathbf{k}, \mathbf{x}) = \sqrt{\epsilon(\mathbf{k})^2 + 2\epsilon(\mathbf{k}) [\mu - V(\mathbf{x})]} + \mathcal{O}(\eta). \quad (6.229)$$

Die Zahl N_0 der kondensierten Teilchen ist durch raumliche Integration der Kondensatdichte (6.228) festgelegt:

$$N_0 = \int d^D x n_0(\mathbf{x}). \quad (6.230)$$

Werden wir das effektive Potential (6.221) an dem extremalen Wert (6.228) der Kondensatdichte aus, so erhalten wir die grokanonische freie Energie

$$\mathcal{F} = \int d^D x \left\{ -\frac{[\mu - V(\mathbf{x})]^2}{2g} + \eta \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left[\frac{E(\mathbf{k}, \mathbf{x})}{2} + \frac{1}{\beta} \ln \left(1 - e^{-\beta E(\mathbf{k}, \mathbf{x})} \right) \right] \right\} + \mathcal{O}(\eta^2). \quad (6.231)$$

Die gesamte Teilchenzahl N ergibt sich durch Differentiation von (6.231) nach dem chemischen Potential zu

$$N = \int d^D x n(\mathbf{x}), \quad (6.232)$$

wobei die Teilchendichte $n(\mathbf{x})$ lautet

$$n(\mathbf{x}) = \frac{\mu - V(\mathbf{x})}{g} - \eta \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{\epsilon(\mathbf{k})}{E(\mathbf{k}, \mathbf{x})} \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta E(\mathbf{k}, \mathbf{x})} - 1} \right\} + \mathcal{O}(\eta^2). \quad (6.233)$$

Wir beschränken uns nun auf den absoluten Temperaturnullpunkt $T = 0$. Dann lassen sich unter Berücksichtigung der freien Dispersion (6.80) die Integrale über die Wellenvektoren \mathbf{k} mit Hilfe der Integrationsformel (6.135) auswerten. Für die Kondensatdichte (6.228), (6.229) erhalten wir

$$n_0(\mathbf{x}) = \frac{\mu - V(\mathbf{x})}{g} - \frac{\eta}{2\Gamma(D/2)} \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2} \right)^{D/2} \int_0^\infty d\epsilon \epsilon^{D/2-1} \frac{2\epsilon + \mu - V(\mathbf{x})}{\sqrt{\epsilon^2 + 2[\mu - V(\mathbf{x})]\epsilon}} + \mathcal{O}(\eta^2), \quad (6.234)$$

wobei das ϵ -Integral mit Hilfe von (6.137), (6.138) berechenbar ist. Damit ergibt sich schließlich die Kondensatdichte zu

$$\begin{aligned} n_0(\mathbf{x}) &= \frac{\mu - V(\mathbf{x})}{g} - \eta \frac{2^{D/2-3}(3D-4)\Gamma((D-1)/2)\Gamma(-D/2)}{\sqrt{\pi}\Gamma(D/2)} \\ &\quad \times \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2} \right)^{D/2} [\mu - V(\mathbf{x})]^{D/2} + \mathcal{O}(\eta^2). \end{aligned} \quad (6.235)$$

Entsprechend gilt für die Teilchendichte (6.229), (6.233)

$$n(\mathbf{x}) = \frac{\mu - V(\mathbf{x})}{g} - \frac{\eta}{2\Gamma(D/2)} \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2} \right)^{D/2} \int_0^\infty d\epsilon \epsilon^{D/2-1} \frac{\epsilon}{\sqrt{\epsilon^2 + 2[\mu - V(\mathbf{x})]\epsilon}} + \mathcal{O}(\eta^2), \quad (6.236)$$

woraus wir

$$\begin{aligned} n(\mathbf{x}) &= \frac{\mu - V(\mathbf{x})}{g} - \eta \frac{2^{D/2-2}(D-1)\Gamma((D-1)/2)\Gamma(-D/2)}{\sqrt{\pi}\Gamma(D/2)} \\ &\quad \times \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2} \right)^{D/2} [\mu - V(\mathbf{x})]^{D/2} + \mathcal{O}(\eta^2) \end{aligned} \quad (6.237)$$

erhalten. Wir bemerken zur Kontrolle, daß im Falle eines verschwindenden 1-Teilchen-Potentials $V(\mathbf{x})$ durch Elimination des chemischen Potentials μ in (6.235) und (6.237) das frühere Resultat (6.139) des homogenen Bose-Gases folgt.

Um nun gemäß (6.230) bzw. (6.232) aus den Dichten (6.235) und (6.237) die Zahl N_0 bzw. N von Bosonen im Kondensat bzw. der Falle zu berechnen, ist das Integral

$$I_\nu = \int d^D x [\mu - V(\mathbf{x})]^\nu \quad (6.238)$$

auszuwerten. Hierbei erstreckt sich die Integration über denjenigen Raumbereich, bei dem die Ungleichung $\mu \geq V(\mathbf{x})$ erfüllt ist. Wir betrachten wieder einen anisotropen harmonischen Oszillator (2.213) und erhalten aus (6.238) mit der Substitution $y_i = \sqrt{M\omega_i^2/2\mu} x_i$

$$I_\nu = \left(\frac{2\mu}{M} \right)^{D/2} \frac{\mu^\nu}{\tilde{\omega}^D} \int d^D y (1 - \mathbf{y}^2)^\nu, \quad (6.239)$$

wobei die Integration auf die Einheitskugel (6.199) eingeschränkt ist. Der Übergang zu Kugelkoordinaten führt auf

$$I_\nu = \left(\frac{2\mu}{M} \right)^{D/2} \frac{\mu^\nu O_D}{\tilde{\omega}^D} \int_0^1 d\rho \rho^{D-1} (1 - \rho^2)^\nu. \quad (6.240)$$

Mit der anschließenden Substitution $t(\rho) = \rho^2$ geht (6.240) über in

$$I_\nu = \left(\frac{2\mu}{M}\right)^{D/2} \frac{\mu^\nu O_D}{2\tilde{\omega}^D} \int_0^1 dt t^{D/2-1} (1-t)^\nu, \quad (6.241)$$

so daß sich die Integraldarstellung (6.261) der Beta-Funktion (6.257) anwenden läßt. Als Ergebnis erhalten wir

$$I_\nu = \frac{\Gamma(D/2)\Gamma(\nu+1)\mu^\nu O_D}{2\Gamma(D/2+\nu+1)\tilde{\omega}^D} \left(\frac{2\mu}{M}\right)^{D/2}. \quad (6.242)$$

Setzt man (6.237) in (6.232) ein, so läßt sich die Integration mit Hilfe von (6.238), (6.242) explizit durchführen. Unter Verwendung der Verdopplungsformel für die Gamma-Funktion [16]

$$\Gamma(2x) = \frac{2^{2x-1}}{\sqrt{\pi}} \Gamma(x)\Gamma\left(x + \frac{1}{2}\right) \quad (6.243)$$

lautet die Teilchenzahl N als Funktion des chemischen Potentials μ :

$$N = \frac{O_D \hbar \tilde{\omega}}{D(D+2)g} \left(\frac{\hbar}{M\tilde{\omega}}\right)^{D/2} \left(\frac{2\mu}{\hbar\tilde{\omega}}\right)^{(D+2)/2} - \eta \frac{\Gamma(-D/2)O_D}{2^{3D/2+2}\pi^{D/2}} \left(\frac{2\mu}{\hbar\tilde{\omega}}\right)^D + \mathcal{O}(\eta^2). \quad (6.244)$$

Wir bemerken, daß durch Vernachlässigung des Bogoliubov-Termes, d.h. im Falle $\eta = 0$, aus (6.244) unseres früheren Resultat (6.202) hervorgeht. Wir invertieren nun (6.244), um umgekehrt das chemische Potential μ als Funktion der Teilchenzahl N zu erhalten:

$$\begin{aligned} \mu = & \frac{\hbar\tilde{\omega}}{2} \left[\frac{D(D+2)gN}{O_D \hbar \tilde{\omega}} \left(\frac{M\tilde{\omega}}{\hbar}\right)^{D/2} \right]^{2/(D+2)} \left\{ 1 + \eta \frac{D\Gamma(-D/2)g}{2^{3D/2+1}\pi^{D/2}\hbar\tilde{\omega}} \right. \\ & \left. \times \left(\frac{M\tilde{\omega}}{\hbar}\right)^{D/2} \left[\frac{D(D+2)gN}{O_D \hbar \tilde{\omega}} \left(\frac{M\tilde{\omega}}{\hbar}\right)^{D/2} \right]^{(D-2)/(D+2)} \right\}. \end{aligned} \quad (6.245)$$

Entsprechend berechnen wir aus (6.230), (6.235), (6.238), (6.242) und (6.243) die Zahl der kondensierten Bosonen zu

$$N_0 = \frac{O_D \hbar \tilde{\omega}}{D(D+2)g} \left(\frac{\hbar}{M\tilde{\omega}}\right)^{D/2} \left(\frac{2\mu}{\hbar\tilde{\omega}}\right)^{(D+2)/2} - \eta \frac{(3D-4)\Gamma(-D/2)O_D}{2^{3D/2+3}(D-1)\pi^{D/2}} \left(\frac{2\mu}{\hbar\tilde{\omega}}\right)^D + \mathcal{O}(\eta^2). \quad (6.246)$$

Eliminieren wir aus (6.246) das chemische Potential (6.245), so erhalten wir eine direkte Beziehung zwischen N und N_0 :

$$N = N_0 + \frac{(D-2)\Gamma(-D/2)O_D}{2^{3D/2+3}(D-1)\pi^{D/2}} \left[\frac{D(D+2)gN}{O_D \hbar \tilde{\omega}} \left(\frac{M\tilde{\omega}}{\hbar}\right)^{D/2} \right]^{2D/(D+2)}. \quad (6.247)$$

Durch eine Spezialisierung auf $D = 3$ Raumdimensionen und durch Beachtung von (5.130), (6.133) und (6.172) ergibt sich für die Entleerung des Grundzustandes [39]:

$$\frac{N - N_0}{N} = \frac{5^{6/5} 3^{1/5}}{2^{9/2}} \left(\frac{N^{1/6} a}{\tilde{L}}\right)^{6/5} \approx 0.38 \left(\frac{N^{1/6} a}{\tilde{L}}\right)^{6/5}. \quad (6.248)$$

Wir berechnen nun die Größenordnung dieser Entleerung für das in Abschnitt 4.11 behandelte ^{87}Rb -Experiment [18]. Hier liegen $N = 40\,000$ ^{87}Rb -Atome mit der s-Wellenstreuungslänge $a = 4.76$ nm [5] vor. Das geometrische Mittel $\tilde{\omega}$ ist gemäß (4.241) gegeben durch $\tilde{\omega} = 2\pi f_3/8^{1/3}$ mit $f_3 = 373$ Hz. Mit der Masse $M \approx 87 \cdot 1.67 \cdot 10^{-27}$ kg ergibt sich die Oszillatorlängenskala (6.172) zu $\tilde{L} \approx 0.785$ μm . Demnach beträgt die Entleerung des Grundzustandes (6.248) etwa 0.69 %, es handelt sich also um einen sehr kleinen Effekt. Dies unterstreicht nochmals, daß es sich im Experiment [18] um ein schwach wechselwirkendes ^{87}Rb -Gas handelt. Es ist allerdings denkbar, die Entleerung des Grundzustandes (6.248) durch eine Vergrößerung von Teilchenzahl N , s-Wellenstreuungslänge a oder mittlerer Fallenfrequenz $\tilde{\omega}$ zu erhöhen.

Zum Schluß stellen wir uns die Frage, ob die Entleerung des Grundzustandes mit oder ohne Falle größer ist. Hierbei berücksichtigen wir, daß die Entleerung des Grundzustandes für das homogene Bose-Gas gemäß (6.142) von der homogenen Teilchendichte n abhängt. In der anisotropen harmonischen Falle ist die Entleerung des Grundzustandes durch (6.248) gegeben. Wir zeigen nun, daß sich die rechte Seite von (6.248) durch die Teilchendichte $n(\mathbf{0})$ am Ursprung ausdrücken läßt. Aus (5.130), (6.172), (6.203) und (6.237) lesen wir ab

$$n(\mathbf{0}) = \frac{15^{2/5}}{8\pi a \tilde{L}^2} \left(\frac{aN}{\tilde{L}} \right)^{2/5}, \quad (6.249)$$

und erhalten somit aus (6.248):

$$\frac{N - N_0}{N} = \frac{5\sqrt{\pi}}{8} \sqrt{n(\mathbf{0})a^3}. \quad (6.250)$$

Wir vergleichen nun zwei Bose-Gase mit und ohne Falle, die dieselbe s-Wellenstreuungslänge a und dieselbe Teilchendichte $n = n(\mathbf{0})$ besitzen. Aus (6.142) und (6.248) folgt dann

$$\frac{\left(\frac{N - N_0}{N} \right)_{\text{harm. Falle}}}{\left(\frac{N - N_0}{N} \right)_{\text{hom. Gas}}} = \frac{15\pi}{64} \approx 0.736 < 1. \quad (6.251)$$

Demnach ist die Entleerung des Grundzustandes in der harmonischen Falle kleiner als beim homogenen Bose-Gas.

6.13 Anhang: Veltman-Regel

In diesem Abschnitt begründen wir die Veltman-Regel

$$\int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} (\mathbf{k}^2)^\alpha = 0 \quad (6.252)$$

mit der Methode der analytischen Fortsetzung [3]. Hierzu betrachten wir das Integral

$$I_{a,D} = \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{1}{(\mathbf{k}^2 + m^2)^a}, \quad (6.253)$$

das zunächst nur für solche Parameter a , D definiert ist, die der Ungleichung

$$D < 2a \quad (6.254)$$

genügen. Durch zweimalige Anwendung des Schwinger-Tricks (2.226) können wir das Integral (6.253) explizit ausrechnen:

$$I_{a,D} = \frac{\Gamma(a - D/2)}{(4\pi)^{D/2} \Gamma(a) (m^2)^{a-D/2}}. \quad (6.255)$$

Die Gamma-Funktion $\Gamma(x)$ ist nun in der ganzen komplexen Ebene mit Ausnahme der Stellen $x = 0, -1, -2, \dots$ analytisch fortsetzbar. Deshalb läßt sich auch das Integral (6.253) durch (6.255) für alle $D \geq 2a$ analytisch fortsetzen, wobei die speziellen Werte $D = 2a, 2a + 2, 2a + 4, \dots$ auszuschließen sind. Im Limes $a \rightarrow 0$ folgt daher

$$\int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} = 0 \quad (6.256)$$

für $D \neq 2, 4, 6, \dots$. Betrachtet man auch noch andere Integrale, so läßt sich durch analytische Fortsetzung (6.256) sogar für alle D zeigen [3]. Geht man zu Kugelkoordinaten über, so folgt aus (6.256) schließlich die Veltman-Regel (6.252).

6.14 Anhang: Beta-Funktion

Wir leiten in diesem Abschnitt eine nützliche Integraldarstellung für die Beta-Funktion

$$B(x, y) = \frac{\Gamma(x)\Gamma(y)}{\Gamma(x+y)} \quad (6.257)$$

ab. Hierzu verwenden wir sowohl für $\Gamma(x)$ als auch für $\Gamma(y)$ die Integraldarstellung der Gamma-Funktion:

$$B(x, y) = \frac{1}{\Gamma(x+y)} \int_0^\infty d\sigma \int_0^\infty d\tau \sigma^{x-1} \tau^{y-1} e^{-(\sigma+\tau)}. \quad (6.258)$$

Mit Hilfe der Polarkoordinaten $\sigma = \rho \cos \varphi$, $\tau = \rho \sin \varphi$ geht (6.258) über in

$$B(x, y) = \frac{1}{\Gamma(x+y)} \int_0^\infty d\rho \int_0^{\pi/2} d\varphi (\cos \varphi)^{x-1} (\sin \varphi)^{y-1} \rho^{x+y-1} e^{-(\cos \varphi + \sin \varphi)\rho}. \quad (6.259)$$

Das ρ -Integral in (4.28) läßt sich unmittelbar mit Hilfe von (2.226) ausführen:

$$B(x, y) = \int_0^{\pi/2} d\varphi \frac{(\cos \varphi)^{x-1} (\sin \varphi)^{y-1}}{(\cos \varphi + \sin \varphi)^{x+y}}. \quad (6.260)$$

Für die φ -Integration substituieren wir gemäß $t(\varphi) = 1/(1 + \tan \varphi)$ und erhalten dadurch die gesuchte Integraldarstellung der Beta-Funktion:

$$B(x, y) = \int_0^1 dt t^{x-1} (1-t)^{y-1}. \quad (6.261)$$

Kapitel 7

Dynamische Eigenschaften der Kondensate

7.1 Zeitabhängige Gross-Pitaevskii-Gleichung

Im vorhergehenden Kapitel haben wir die thermodynamischen Eigenschaften der Kondensate durch die zeitunabhängige Gross-Pitaevskii-Gleichung (6.154) beschrieben. Es handelt sich hierbei um eine nichtlineare Schrödinger-Gleichung, bei der die Nichtlinearität die 2-Teilchen-Wechselwirkung zwischen den Bosonen beschreibt. Um nun am absoluten Temperaturnullpunkt $T = 0$ die dynamischen Eigenschaften der Kondensate zu studieren, verwenden wir eine zeitabhängige Verallgemeinerung dieser nichtlinearen Schrödinger-Gleichung. Auf diese Weise erhalten wir die zeitabhängige Gross-Pitaevskii-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{x}, t) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + V(\mathbf{x}) + g|\Psi(\mathbf{x}, t)|^2 \right\} \Psi(\mathbf{x}, t). \quad (7.1)$$

Umgekehrt geht diese zeitabhängige Gross-Pitaevskii-Gleichung durch den Lösungsansatz

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \Psi(\mathbf{x}) e^{-i\mu t/\hbar} \quad (7.2)$$

in die entsprechende zeitunabhängige Gross-Pitaevskii-Gleichung (6.154) über. Demnach übernimmt das chemische Potential μ die Rolle, die bei der linearen Schrödinger-Gleichung dem Energieeigenwert zukommt.

7.2 Hydrodynamische Gleichungen

Da die Kondensatwellenfunktion $\Psi(\mathbf{x}, t)$ komplex ist, muß man mit (7.1) auch die dazu konjugiert komplexe Gleichung betrachten:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(\mathbf{x}, t) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + V(\mathbf{x}) + g|\Psi(\mathbf{x}, t)|^2 \right\} \Psi^*(\mathbf{x}, t). \quad (7.3)$$

Wir beobachten, daß wir für die nichtlineare Gross-Pitaevskii-Gleichung dieselbe Kontinuitätsgleichung wie für die lineare Schrödinger-Gleichung ableiten können. Die Multiplikation von (7.1) mit $\Psi^*(\mathbf{x}, t)$ und von (7.3) mit $\Psi(\mathbf{x}, t)$ führt nämlich auf

$$\frac{\partial}{\partial t} n(\mathbf{x}, t) + \nabla \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = 0. \quad (7.4)$$

Hierbei bezeichnet

$$n(\mathbf{x}, t) = |\Psi(\mathbf{x}, t)|^2 \quad (7.5)$$

die Kondensatdichte, die gemäß Abschnitt 6.8 mit der Teilchendichte übereinstimmt. Ferner stellt

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \frac{\hbar}{2Mi} \left\{ \Psi^*(\mathbf{x}, t) \nabla \Psi(\mathbf{x}, t) - \Psi(\mathbf{x}, t) \nabla \Psi^*(\mathbf{x}, t) \right\} \quad (7.6)$$

die Stromdichte des Kondensates dar. Sie gibt an, wieviele Bosonen pro Zeit- und Flächeneinheit durch ein Flächenelement fliegen, wenn das Flächenelement am Orte \mathbf{x} zur Zeit t senkrecht zu $\mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$ gerichtet ist. Die Kontinuitätsgleichung (7.4) hat aufgrund des Gaußschen Satzes zur Folge, daß sich die Normierung der Kondensatdichte $n(\mathbf{x}, t)$ nicht mit der Zeit ändert:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int d^D x n(\mathbf{x}, t) = 0 \quad \rightarrow \quad \int d^D x n(\mathbf{x}, t) = \int d^D x n(\mathbf{x}, t_0). \quad (7.7)$$

Ist demnach die Kondensatdichte $n(\mathbf{x}, t)$ zur Zeit $t = t_0$ auf N Teilchen normiert

$$N = \int d^D x n(\mathbf{x}, t_0), \quad (7.8)$$

so gilt das auch für die Zeit t :

$$N = \int d^D x n(\mathbf{x}, t). \quad (7.9)$$

Wir faktorisieren die Stromdichte gemäß

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = n(\mathbf{x}, t) \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) \quad (7.10)$$

und definieren dadurch die Geschwindigkeit $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ des Kondensates:

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \frac{\hbar}{2Mi} \frac{\Psi^*(\mathbf{x}, t) \nabla \Psi(\mathbf{x}, t) - \Psi(\mathbf{x}, t) \nabla \Psi^*(\mathbf{x}, t)}{\Psi^*(\mathbf{x}, t) \Psi(\mathbf{x}, t)}. \quad (7.11)$$

Um das Geschwindigkeitsfeld $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ physikalisch besser interpretieren zu können, zerlegen wir die Kondensatwellenfunktion aufgrund von (7.5) gemäß

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \sqrt{n(\mathbf{x}, t)} e^{i\varphi(\mathbf{x}, t)}. \quad (7.12)$$

Durch Einsetzen von (7.12) in (7.11) erhalten wir eine Beziehung zwischen der Phase $\varphi(\mathbf{x}, t)$ und der Geschwindigkeit $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$:

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \frac{\hbar}{M} \nabla \varphi(\mathbf{x}, t). \quad (7.13)$$

Demnach ist das Geschwindigkeitsfeld $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ ein Gradientenfeld. Wenn die Phase keine Singularitäten aufweist, d.h. zu allen Zeiten im gesamten Raum stetig differenzierbar ist, verschwindet die Rotation des Geschwindigkeitsfeldes:

$$\operatorname{rot} \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{0}. \quad (7.14)$$

In diesem Fall ist die Bewegung des Kondensates gegenüber einer klassischen Flüssigkeit eingeschränkt, da dort auch Wirbel auftreten können.

Wir werden nun die Bewegungsgleichung für das Geschwindigkeitsfeld $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ aufstellen. Hierzu setzen wir die Zerlegung (7.12) in die zeitabhängige Gross-Pitaevskii-Gleichung (7.1) ein:

$$i\hbar \left\{ \frac{1}{2\sqrt{n}} \frac{\partial n}{\partial t} + i\sqrt{n} \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right\} = -\frac{\hbar^2}{2M} \left\{ \nabla^2 \sqrt{n} + 2i\nabla \sqrt{n} \nabla \varphi + i\sqrt{n} \nabla^2 \varphi - \sqrt{n} (\nabla \varphi)^2 \right\} + V\sqrt{n} + gn\sqrt{n}. \quad (7.15)$$

Der Imaginärteil von (7.15) entspricht unter Berücksichtigung von (7.10) und (7.13) gerade der Kontinuitätsgleichung (7.4). Aus dem Realteil von (7.15) erhalten wir dagegen

$$-\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\nabla^2 \sqrt{n}}{\sqrt{n}} + \frac{\hbar^2}{2M} (\nabla \varphi)^2 + V + gn. \quad (7.16)$$

Wenden wir den Gradienten an, so geht (7.16) in die gesuchte Bewegungsgleichung für das Geschwindigkeitsfeld (7.13) über:

$$M \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = -\nabla \left\{ \frac{1}{2} M \mathbf{v}^2 + V + gn - \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\nabla^2 \sqrt{n}}{\sqrt{n}} \right\}. \quad (7.17)$$

Demnach genügt das Geschwindigkeitsfeld $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ einer Euler-Gleichung für ideale, d.h. reibungsfreie, Strömung. Dabei treten als Kräfte neben den Gradienten der kinetischen Energie, des Fallenpotentials und der Wechselwirkung noch ein zusätzlicher Druckterm auf, der sogenannte Quantendruck

$$p_{\text{qm}} = -\frac{\hbar^2}{2M} \sqrt{n} \nabla^2 \sqrt{n}, \quad (7.18)$$

mit einer Energie p_{qm}/n pro Teilchen. Er rührt von der räumlichen Variation der Kondensatdichte her. Die Euler-Gleichung (7.17) ist demnach von der Form

$$\frac{\partial \mathbf{v}(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + [\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) \nabla] \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{M} \nabla \left\{ V(\mathbf{x}) + gn(\mathbf{x}, t) - \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\nabla^2 \sqrt{n(\mathbf{x}, t)}}{\sqrt{n(\mathbf{x}, t)}} \right\}. \quad (7.19)$$

Diese hydrodynamische Bewegungsgleichung bildet zusammen mit der aus (7.4), (7.10) folgenden Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} n(\mathbf{x}, t) + \nabla [n(\mathbf{x}, t) \mathbf{v}(\mathbf{x}, t)] = 0 \quad (7.20)$$

ein nichtlineares partielles Differentialgleichungssystem für die Teilchendichte $n(\mathbf{x}, t)$ und das Geschwindigkeitsfeld $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$, das zur zeitabhängigen Gross-Pitaevskii-Gleichung (7.1), (7.3) äquivalent ist.

7.3 Elementare Anregungen

Wir erweitern nun die Thomas-Fermi-Näherung auf die Dynamik der Kondensate. Dies bedeutet, daß wir die räumliche Variation der Kondensatdichte $n(\mathbf{x}, t)$ vernachlässigen, die durch den Quantendruck (7.18) beschrieben wird. Dadurch vereinfacht sich die Euler-Gleichung (7.19) des Kondensates auf

$$\frac{\partial \mathbf{v}(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + [\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) \nabla] \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{M} \nabla \left\{ V(\mathbf{x}) + gn(\mathbf{x}, t) \right\}. \quad (7.21)$$

Die hydrodynamischen Gleichungen (7.20), (7.21) besitzen als Gleichgewichtszustand die Thomas-Fermi-Näherung (6.194):

$$n_{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) = \frac{\mu - V(\mathbf{x})}{g}, \quad \mathbf{v}_{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{0}. \quad (7.22)$$

Hierbei ist das chemische Potential μ durch die Normierungsbedingung (7.9) festgelegt. Wir suchen nun Lösungen der hydrodynamischen Gleichungen (7.20), (7.21) für schwache Anregungen aus diesem Gleichgewichtszustand (7.22). Wir zerlegen daher Kondensatdichte und Geschwindigkeitsfeld gemäß

$$n(\mathbf{x}, t) = n_{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) + \delta n(\mathbf{x}, t), \quad (7.23)$$

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{v}_{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) + \delta \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) \quad (7.24)$$

und linearisieren die Bewegungsgleichungen (7.20), (7.21) in den Abweichungen $\delta n(\mathbf{x}, t)$, $\delta \mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$. Dabei erhalten wir unter Berücksichtigung von (7.22) das gekoppelte Gleichungssystem

$$\frac{\partial}{\partial t} \delta n(\mathbf{x}, t) = -\nabla \left\{ \frac{\mu - V(\mathbf{x})}{g} \delta \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) \right\}, \quad (7.25)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \delta \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = -\frac{g}{M} \nabla \delta n(\mathbf{x}, t). \quad (7.26)$$

Wendet man eine partielle Zeitableitung auf (7.25) an, so läßt sich das Geschwindigkeitsfeld $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ mit Hilfe von (7.26) eliminieren. Die resultierende Bewegungsgleichung für die Abweichung der Kondensatdichte aus dem Gleichgewichtszustand lautet

$$M \frac{\partial^2}{\partial t^2} \delta n(\mathbf{x}, t) = \left[\mu - V(\mathbf{x}) \right] \Delta \delta n(\mathbf{x}, t) - \nabla V(\mathbf{x}) \nabla \delta n(\mathbf{x}, t). \quad (7.27)$$

Als erstes Beispiel betrachten wir das homogene Bose-Gas, bei dem das 1-Teilchen-Potential $V(\mathbf{x})$ verschwindet. Die Gleichgewichtslösung der Kondensatdichte (7.22) lautet dann

$$n_{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) = \frac{\mu}{g}, \quad (7.28)$$

wobei das chemische Potential μ aufgrund der Normierungsbedingung (7.9) durch

$$\mu = \frac{Ng}{V} \quad (7.29)$$

bestimmt ist. Ferner vereinfacht sich die Bewegungsgleichung (7.27) auf die Wellengleichung

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \right) \delta n(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (7.30)$$

mit der Ausbreitungsgeschwindigkeit

$$c = \sqrt{\frac{\mu}{M}}. \quad (7.31)$$

Demnach sind die Abweichungen der Kondensatdichte ebene Wellen

$$\delta n(\mathbf{x}, t) = \delta n e^{i(\mathbf{k}\mathbf{x} - \omega t)} \quad (7.32)$$

mit der linearen Dispersion

$$\omega = c |\mathbf{k}|. \quad (7.33)$$

Dabei stimmt die Ausbreitungsgeschwindigkeit (7.31) aufgrund von (7.29) mit der der Bogoliubov-Theorie (6.126) überein. Hätte man den Quantendruck (7.18) in (7.19) aufgrund der Thomas-Fermi-Näherung nicht vernachlässigt, so hätte man für die ebenen Wellen (7.32) sogar die gesamte Bogoliubov-Dispersion (6.80), (6.123) erhalten [5]. Dieses Ergebnis zeigt, daß die thermodynamischen und die dynamischen Eigenschaften des Kondensates eng miteinander verbunden sind.

7.4 Isotrope Harmonische Falle

Wir diskutieren nun eine isotrope harmonische Falle $V(r) = M\omega^2 r^2/2$ in der Thomas-Fermi-Näherung. Dabei stehen chemisches Potential μ und Thomas-Fermi-Radius R gemäß (6.207) in Beziehung. Aufgrund der Rotationssymmetrie des Problems verwenden wir Kugelkoordinaten, um die Bewegungsgleichung (7.27) zu formulieren. Für eine zeitlich oszillierende Lösung

$$\delta n(\mathbf{x}, t) = \delta n(r, \vartheta, \varphi) e^{-i\Omega t} \quad (7.34)$$

lautet die Bewegungsgleichung

$$\Omega^2 \delta n(r, \vartheta, \varphi) = \omega^2 r \frac{\partial \delta n(r, \vartheta, \varphi)}{\partial r} - \frac{\omega^2}{2} (R^2 - r^2) \left\{ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{r^2 \hbar^2} \right\} \delta n(r, \vartheta, \varphi). \quad (7.35)$$

Wir separieren Radial- und Winkelabhängigkeit der Abweichungen gemäß

$$\delta n(r, \vartheta, \varphi) = A(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi), \quad (7.36)$$

so daß wir aufgrund des Eigenwertproblems (5.30) folgende Radialgleichung erhalten:

$$\Omega^2 A(r) = \omega^2 r \frac{\partial A(r)}{\partial r} - \frac{\omega^2}{2} (R^2 - r^2) \left\{ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} A(r). \quad (7.37)$$

Um der Zentrifugalbarriere Rechnung zu tragen, machen wir den Lösungsansatz

$$A(r) = r^l B(r), \quad (7.38)$$

so daß (7.37) übergeht in

$$\Omega^2 B(r) = \omega^2 l B(r) + \omega^2 r \frac{\partial B(r)}{\partial r} - \frac{\omega^2}{2} (R^2 - r^2) \left\{ \frac{\partial^2 B(r)}{\partial r^2} + \frac{2(l+1)}{r} \frac{\partial B(r)}{\partial r} \right\}. \quad (7.39)$$

Wir führen nun dimensionslose Größen

$$\epsilon = \frac{\Omega^2}{\omega^2}, \quad u = \frac{r^2}{R^2} \quad (7.40)$$

ein und erhalten

$$\left\{ u(1-u) \frac{\partial^2}{\partial u^2} + \left(\frac{2l+3}{2} - \frac{2l+5}{2} u \right) \frac{\partial}{\partial u} + \frac{\epsilon-l}{2} \right\} B(u) = 0. \quad (7.41)$$

Diese Differentialgleichung ist von der allgemeinen Form

$$\left\{ u(1-u) \frac{\partial^2}{\partial u^2} + [\gamma - (\alpha + \beta + 1)u] \frac{\partial}{\partial u} - \alpha\beta \right\} {}_2F_1(\alpha, \beta; \gamma; u) = 0, \quad (7.42)$$

die durch die hypergeometrische Funktion [40]

$${}_2F_1(\alpha, \beta; \gamma; u) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_k (\beta)_k}{(\gamma)_k} \frac{u^k}{k!} \quad (7.43)$$

gelöst wird. Hierbei bezeichnet $(\alpha)_k$ das Pochhammer-Symbol

$$(\alpha)_k = \alpha(\alpha+1) \cdot \dots \cdot (\alpha+k-1) = \frac{\Gamma(\alpha+k)}{\Gamma(\alpha)}, \quad (7.44)$$

so daß die ersten Terme von (7.44) gegeben sind durch

$${}_2F_1(\alpha, \beta; \gamma; u) = 1 + \frac{\alpha\beta}{\gamma} u + \frac{\alpha(\alpha+1)\beta(\beta+1)}{2\gamma(\gamma+1)} u^2 + \dots \quad (7.45)$$

Der Vergleich von (7.41) mit (7.42) legt die Parameter α, β, γ der hypergeometrischen Funktion (7.43) fest. Wir erhalten zum einen

$$\gamma = l + \frac{3}{2} \quad (7.46)$$

und zum anderen

$$\alpha + \beta = l + \frac{3}{2}, \quad \alpha\beta = -\frac{\epsilon-l}{2}. \quad (7.47)$$

Wir müssen nun gewährleisten, daß unsere Lösung im Limes $r \rightarrow \infty$, d.h. $u \rightarrow \infty$, nicht divergiert. Dies ist dann gewährleistet, wenn die Taylor-Reihe (7.43) nach einer endlichen Ordnung abbricht. Aus der Definition des Pochhammer-Symbols (7.44) lesen wir ab, daß das gewährleistet ist, wenn α oder β eine negative ganze Zahl $-n$ ist. Wir beobachten, daß die hypergeometrische Funktion

(7.43) in α und β symmetrisch ist, was sich auch in (7.47) widerspiegelt. Deshalb setzen wir ohne Beschränkung der Allgemeinheit

$$\alpha = -n. \quad (7.48)$$

Aus (7.47) folgt dann sowohl

$$\beta = l + n + \frac{3}{2} \quad (7.49)$$

als auch

$$\epsilon = 2n^2 + 2nl + 3n + l. \quad (7.50)$$

Aus (7.34), (7.36), (7.38), (7.40), (7.46), (7.48) und (7.49) lesen wir die Normalmoden der Kondensatwolke ab

$$\delta n(\mathbf{x}, t) = r^l {}_2F_1 \left(-n, l + n + \frac{3}{2}; l + \frac{3}{2}; \frac{r^2}{R^2} \right) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) e^{-i\Omega t}, \quad (7.51)$$

wobei deren Frequenz Ω gegeben ist durch

$$\Omega = \omega \sqrt{2n^2 + 2nl + 3n + l}. \quad (7.52)$$

Hierbei charakterisiert der Index $n = 0, 1, 2, \dots$ die Radialmoden. Die Normalmoden, die keine radiale Anregungen enthalten, für die also $n = 0$ gilt, haben die Frequenz

$$n = 0 : \quad \Omega = \omega \sqrt{l}. \quad (7.53)$$

Für sie reduziert sich (7.51) aufgrund von (7.43), (7.44) auf

$$n = 0 : \quad \delta n(\mathbf{x}, t) = r^l Y_{lm}(\vartheta, \varphi) e^{-i\Omega t}. \quad (7.54)$$

Wir lesen aus (7.54) ab, daß die Normalmoden $n = 0$ mit zunehmendem l immer mehr an der Oberfläche der Kondensatwolke lokalisiert sind. Deshalb bezeichnet man sie auch als Oberflächenmoden. Die Monopolmode $l = 0$ ist insofern trivial, als sie aufgrund von (7.53), (7.54) sowohl zeitlich als auch räumlich konstant ist. Bei der Dipolmode $l = 1$ gilt gemäß (7.53) $\Omega = \omega$, d.h. das Kondensat oszilliert mit einer Frequenz Ω , die mit der harmonischen Fallenfrequenz ω übereinstimmt. Dies ist kein Zufall, sondern rührt daher, daß diese Dipolschwingung der Schwerpunktsbewegung des Systems entspricht und daher bei einer harmonischen Falle mit der Fallenfrequenz erfolgt. Die 2-Teilchen-Wechselwirkung kann weder die Form noch die Frequenz dieser Dipolschwingung beeinflussen, da Schwerpunkt- und Relativbewegung entkoppeln. Aufgrund ihrer physikalischen Bedeutung bezeichnet man diese Dipolmode $l = 1$, die bei der isotropen harmonischen Falle mit $m = 0, \pm 1$ dreifach entartet ist, als Kohn-Moden. Der Umstand, daß die Frequenz dieser Dipolmode unabhängig von der 2-Teilchen-Wechselwirkung ist, kann man sowohl theoretisch als auch experimentell ausnutzen. Zum einen kann man dies als wichtigen Test für die Güte analytischer oder numerischer Verfahren ansehen, mit denen die Bewegungsgleichungen gelöst werden. Zum

anderen dient dies dazu, die tatsächlich realisierte Fallenfrequenz mit hoher Genauigkeit zu messen. Wir bemerken, daß Oberflächenmoden mit $l > 1$ mehr Nullstellen besitzen und dadurch Frequenzen Ω haben, die größer als die Fallenfrequenz ω sind.

Wir wollen nun nicht die jeweiligen Schwingungsmoden für verschiedene n, l diskutieren. Es sei aber darauf hingewiesen, daß das Geschwindigkeitsfeld, das diesen Dichteschwankungen entspricht, durch Integration von (7.26) bestimmt werden kann. Von experimenteller Relevanz sind dabei nur die Schwingungsmoden mit kleinen Frequenzen Ω . Beispielsweise erhält man für $l = 0$ und $n = 1$ eine radialsymmetrische Mode, deren radiale Geschwindigkeit überall dasselbe Vorzeichen hat. Man bezeichnet sie deshalb auch als Atmungsmode. Wir bemerken abschließend, daß man die Dichteschwankungen nicht nur für eine isotrope harmonische Falle [41], sondern auch für eine beliebige anisotrope harmonische Falle analytisch berechnen kann [42]. Dabei zeigt sich z.B., daß solche Moden, die bei einer sphärischen Falle entartet sind, bei einer zylindersymmetrischen Falle nicht mehr entartet sind.

7.5 Variationsverfahren

Im vorangegangenen Abschnitt haben wir die elementaren Anregungen des Kondensates in einer isotropen harmonischen Falle im Rahmen der Thomas-Fermi-Näherung untersucht. Das dabei erzielte Resultat (7.52) entspricht den realen Anregungsfrequenzen im asymptotischen Limes, daß die Größe Na/\tilde{L} , die die Stärke der Wechselwirkung charakterisiert, unendlich groß ist. Im Experiment besitzt dagegen Na/\tilde{L} einen endlichen Wert, der zwischen 0.5 und 1000 variieren kann. Daher ist es notwendig, die Anregungsfrequenzen des Kondensates für endliche Na/\tilde{L} näherungsweise zu bestimmen. Hierzu erweitern wir im folgenden das Variationsverfahren, das schon in Abschnitt 6.10 vorgestellt wurde.

Wir beginnen damit, die in Abschnitt 4.2 diskutierte Feldtheorie zur Schrödinger-Gleichung auf die zeitabhängige Gross-Pitaevskii-Gleichung (7.1), (7.3) zu übertragen. Hierzu definieren wir analog zu (4.32) die Wirkung als das Raum-Zeit-Integral

$$\mathcal{A}[\Psi^*, \Psi] = \int dt \int d^D x \mathcal{L} \left(\Psi^*(\mathbf{x}, t), \nabla \Psi^*(\mathbf{x}, t), \frac{\partial \Psi^*(\mathbf{x}, t)}{\partial t}; \Psi(\mathbf{x}, t), \nabla \Psi(\mathbf{x}, t), \frac{\partial \Psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \right) \quad (7.55)$$

mit der Lagrange-Dichte

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & i\hbar \Psi^*(\mathbf{x}, t) \frac{\partial \Psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2M} \nabla \Psi^*(\mathbf{x}, t) \nabla \Psi(\mathbf{x}, t) \\ & - V(\mathbf{x}) \Psi^*(\mathbf{x}, t) \Psi(\mathbf{x}, t) - \frac{g}{2} \Psi^*(\mathbf{x}, t)^2 \Psi(\mathbf{x}, t)^2. \end{aligned} \quad (7.56)$$

Im Falle einer verschwindenden Wechselwirkung $g = 0$ reduziert sich (7.56) auf (4.33). Aus dem Hamiltonschen Prinzip

$$\delta \mathcal{A}[\Psi^*, \Psi] = 0 \quad (7.57)$$

folgen analog zu Abschnitt 4.2 die Euler-Lagrange-Gleichungen

$$\frac{\delta \mathcal{A}}{\delta \Psi^*(\mathbf{x}, t)} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Psi^*(\mathbf{x}, t)} - \nabla \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla \Psi^*(\mathbf{x}, t)} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{\partial \Psi^*(\mathbf{x}, t)}{\partial t}} = 0, \quad (7.58)$$

$$\frac{\delta \mathcal{A}}{\delta \Psi(\mathbf{x}, t)} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Psi(\mathbf{x}, t)} - \nabla \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla \Psi(\mathbf{x}, t)} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{\partial \Psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t}} = 0. \quad (7.59)$$

Mit der Lagrange-Dichte (7.56) gehen sie tatsächlich in die zeitabhängige Gross-Pitaevskii-Gleichung (7.1), (7.3) über .

Wir folgen nun der Arbeit [43] und verwenden beim anisotropen harmonischen Oszillator (2.213) für die Kondensatwellenfunktion $\Psi(\mathbf{x}, t)$ eine Gaußsche Testfunktion:

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \frac{N^{1/2}}{\pi^{D/4} \tilde{A}(t)^{D/2}} \exp \left\{ - \sum_{i=1}^D \left[\frac{1}{2A_i(t)^2} + iB_i(t) \right] x_i^2 \right\}. \quad (7.60)$$

Wir bemerken, daß sich (7.60) im Falle $A_i(t) = A_i$, $B_i = 0$ gerade auf (6.173) reduziert. Durch Einsetzen von (7.60) in (7.55), (7.56) wird die Wirkung zu einem Funktional der Variationsfunktionen $A_i(t)$ und $B_i(t)$

$$\mathcal{A}[A_i, B_i] = \int dt L \left(A_i(t), \dot{A}_i(t); B_i(t), \dot{B}_i(t) \right), \quad (7.61)$$

wobei sich die Lagrange-Funktion aus vier Beiträgen zusammensetzt:

$$L = L_{\text{zeit}} + L_{\text{kin}} + L_{\text{pot}} + L_{\text{int}}. \quad (7.62)$$

Die Lagrange-Funktion der potentielle Energie

$$L_{\text{pot}} = - \int d^D x V(\mathbf{x}) |\Psi(\mathbf{x}, t)|^2 \quad (7.63)$$

führt analog zu (6.177) auf

$$L_{\text{pot}} = - \frac{NM}{4} \sum_{i=1}^D \omega_i^2 A_i(t)^2. \quad (7.64)$$

Entsprechend ergibt sich die Lagrange-Funktion der Wechselwirkungsenergie

$$L_{\text{int}} = - \frac{g}{2} \int d^D x |\Psi(\mathbf{x}, t)|^4 \quad (7.65)$$

analog zu (6.179) zum Ausdruck

$$L_{\text{int}} = - \frac{gN^2}{2(2\pi)^{D/2} \tilde{A}(t)^D}. \quad (7.66)$$

Für die Lagrange-Funktion der kinetischen Energie

$$L_{\text{kin}} = - \frac{\hbar^2}{2M} \int d^D x \nabla \Psi^*(\mathbf{x}) \nabla \Psi(\mathbf{x}) \quad (7.67)$$

erhalten wir zunächst

$$L_{\text{kin}} = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{N}{\pi^{D/2} \tilde{A}(t)^D} \sum_{i=1}^D \left[\frac{1}{A_i(t)^4} + 4B_i(t)^2 \right] \int d^D x x_i^2 \exp \left\{ -\sum_{i=1}^D \frac{x_i^2}{A_i(t)^2} \right\}. \quad (7.68)$$

Die Ausführung des Gaußschen Integrales ergibt

$$L_{\text{kin}} = -N \sum_{i=1}^D \left\{ \frac{\hbar^2}{4MA_i(t)^2} + \frac{\hbar^2}{M} B_i(t)^2 A_i(t)^2 \right\}. \quad (7.69)$$

Schließlich haben wir noch die Lagrange-Funktion

$$L_{\text{zeit}} = i\hbar \int d^D x \Psi^*(\mathbf{x}, t) \frac{\partial \Psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \quad (7.70)$$

zu berechnen, für die wir mit

$$L_{\text{zeit}} = \frac{i\hbar N}{\pi^{D/2} \tilde{A}(t)^D} \sum_{i=1}^D \int d^D x \left\{ -\frac{\dot{A}_i(t)}{2A_i(t)} + \left[\frac{\dot{A}_i(t)}{A_i(t)^3} - i\dot{B}_i(t) \right] x_i^2 \right\} \exp \left\{ -\sum_{i=1}^D \frac{x_i^2}{A_i(t)^2} \right\} \quad (7.71)$$

das Ergebnis

$$L_{\text{zeit}} = \frac{N\hbar}{2} \sum_{i=1}^D A_i(t)^2 \dot{B}_i(t) \quad (7.72)$$

erhalten. Aus (7.64), (7.66), (7.69) und (7.72) lesen wir die gesamte Lagrange-Funktion (7.62) ab:

$$L = N \sum_{i=1}^D \left\{ \frac{\hbar}{2} A_i(t)^2 \dot{B}_i(t) - \frac{\hbar^2}{4MA_i(t)^2} - \frac{\hbar^2}{M} B_i(t)^2 A_i(t)^2 - \frac{M}{4} \omega_i^2 A_i(t)^2 \right\} - \frac{gN^2}{2(2\pi)^{D/2} \tilde{A}(t)^D}. \quad (7.73)$$

Extremalisieren wir die Wirkung (7.61) bezüglich der Variationsfunktionen $A_i(t), B_i(t)$, so führt dies auf die Euler-Lagrange-Gleichungen

$$\frac{\delta \mathcal{A}}{\delta A_i(t)} = \frac{\partial L}{\partial A_i(t)} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{A}_i(t)} = 0, \quad (7.74)$$

$$\frac{\delta \mathcal{A}}{\delta B_i(t)} = \frac{\partial L}{\partial B_i(t)} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{B}_i(t)} = 0. \quad (7.75)$$

Einsetzen von (7.73) in (7.74), (7.75) führt auf

$$-\hbar A_i(t) \dot{B}_i(t) + \frac{2\hbar^2}{M} B_i(t)^2 A_i(t) + \frac{M}{2} \omega_i^2 A_i(t) = \frac{\hbar^2}{2MA_i(t)^3} + \frac{gN}{2(2\pi)^{D/2} \tilde{A}(t)^D A_i(t)}, \quad (7.76)$$

$$B_i(t) = -\frac{M\dot{A}_i(t)}{2\hbar A_i(t)}. \quad (7.77)$$

Eliminiert man $B_i(t)$ in (7.76) mit Hilfe von (7.77), so erhält man für die Variationsfunktion $A_i(t)$ ein geschlossenes Differentialgleichungssystem:

$$\ddot{A}_i(t) + \omega_i^2 A_i(t) = \frac{\hbar^2}{M^2 A_i(t)^3} + \frac{gN}{(2\pi)^{D/2} M \tilde{A}(t)^D A_i(t)}. \quad (7.78)$$

Wir bemerken, daß der Beschleunigungsterm $\ddot{A}_i(t)$ in (7.78) auf die Einführung der imaginären Breite $B_i(t)$ in der Gaußschen Testfunktion (7.60) zurückzuführen ist. Hätten wir $B_i(t) = 0$ gesetzt, so hätten wir für die Breite $A_i(t)$ nur eine statische und keine dynamische Bewegungsgleichung erhalten. In $D = 3$ Raumdimensionen folgt aus (7.78) unter Beachtung von (5.130)

$$\ddot{A}_x(t) + \omega_x^2 A_x(t) = \frac{\hbar^2}{M^2 A_x(t)^3} + \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\hbar^2 a N}{M^2 A_x(t)^2 A_y(t) A_z(t)} \quad (7.79)$$

mit analogen Differentialgleichungen für $A_y(t)$ und $A_z(t)$. Wir führen nun dimensionslose Variablen ein

$$\omega_i = \lambda_i \omega, \quad A_i = \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega}} \alpha_i, \quad \tau = \omega t, \quad (7.80)$$

wobei ω die Frequenzskala festlegt, und erhalten aus (7.79):

$$\ddot{\alpha}_x(\tau) + \lambda_x^2 \alpha_x(\tau) = \frac{1}{\alpha_x(\tau)^3} + \frac{P}{\alpha_x(\tau)^2 \alpha_y(\tau) \alpha_z(\tau)}, \quad (7.81)$$

$$\ddot{\alpha}_y(\tau) + \lambda_y^2 \alpha_y(\tau) = \frac{1}{\alpha_y(\tau)^3} + \frac{P}{\alpha_y(\tau)^2 \alpha_z(\tau) \alpha_x(\tau)}, \quad (7.82)$$

$$\ddot{\alpha}_z(\tau) + \lambda_z^2 \alpha_z(\tau) = \frac{1}{\alpha_z(\tau)^3} + \frac{P}{\alpha_z(\tau)^2 \alpha_x(\tau) \alpha_y(\tau)}. \quad (7.83)$$

Dabei ist der dimensionslose Parameter

$$P = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{aN}{\sqrt{\hbar/M\omega}} \quad (7.84)$$

ein Maß für die Stärke der Wechselwirkung. Die linke Seite der Bewegungsgleichungen (7.81)–(7.83) entsprechen drei harmonischen Oszillatoren. Der erste Term auf der rechten Seite stammt von der kinetischen Energie und führt zu einer Verbreiterung des Wellenpaketes. Der zweite Term dagegen stammt von der nichtlinearen Wechselwirkung zwischen den Teilchen. Abhängig vom Vorzeichen der s-Wellenstrelänge kann dieser Term entweder repulsiv ($a > 0$) oder attraktiv ($a < 0$) sein. Außerdem stellen wir fest, daß die Dynamik der Breiten $\alpha_x(\tau), \alpha_y(\tau), \alpha_z(\tau)$ von der Form

$$\ddot{\alpha}_i(\tau) = -\frac{\partial V_{\text{eff}}(\alpha_x(\tau), \alpha_y(\tau), \alpha_z(\tau))}{\partial \alpha_i(\tau)} \quad (7.85)$$

ist und damit der Bewegung einer Punktmasse im effektiven Potential

$$V_{\text{eff}}(\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z) = \sum_{i=1}^3 \frac{1}{2} \left(\lambda_i^2 \alpha_i^2 + \frac{1}{\alpha_i^2} \right) + \frac{P}{\alpha_x \alpha_y \alpha_z} \quad (7.86)$$

entspricht. Die Ruhelage $\alpha_{x0}, \alpha_{y0}, \alpha_{z0}$ dieser Punktmasse ergibt sich durch Lösung der algebraischen Gleichungen

$$\lambda_x^2 \alpha_{x0} = \frac{1}{\alpha_{x0}^3} + \frac{P}{\alpha_{x0}^2 \alpha_{y0} \alpha_{z0}}, \quad (7.87)$$

$$\lambda_y^2 \alpha_{y0} = \frac{1}{\alpha_{y0}^3} + \frac{P}{\alpha_{y0}^2 \alpha_{z0} \alpha_{x0}}, \quad (7.88)$$

$$\lambda_z^2 \alpha_{z0} = \frac{1}{\alpha_{z0}^3} + \frac{P}{\alpha_{z0}^2 \alpha_{x0} \alpha_{y0}}. \quad (7.89)$$

Im Falle einer attraktiven Wechselwirkung ($P < 0$) gibt es entweder keine oder 2 Gleichgewichtslagen, wobei eine davon stabil und die andere instabil ist. Bei einer repulsiven Wechselwirkung ($P > 0$) liegt dagegen nur eine stabile Gleichgewichtslage vor [43]. Um die Stabilität der Gleichgewichtslagen genauer zu untersuchen, betrachten wir die Auslenkungen

$$\alpha_x(\tau) = \alpha_{x0} + \delta\alpha_x(\tau), \quad (7.90)$$

$$\alpha_y(\tau) = \alpha_{y0} + \delta\alpha_y(\tau), \quad (7.91)$$

$$\alpha_z(\tau) = \alpha_{z0} + \delta\alpha_z(\tau). \quad (7.92)$$

Einsetzen von (7.90)–(7.92) in das effektive Potential (7.86) führt unter Beachtung von (7.87)–(7.89) für kleine Auslenkungen auf

$$V_{\text{eff}}(\alpha_{x0} + \delta\alpha_x, \alpha_{y0} + \delta\alpha_y, \alpha_{z0} + \delta\alpha_z) = V_{\text{eff}}(\alpha_{x0}, \alpha_{y0}, \alpha_{z0}) + \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\lambda_i^2}{2} + \frac{3}{2\alpha_{i0}^4} + \frac{P}{\alpha_{i0}^2 \alpha_{x0} \alpha_{y0} \alpha_{z0}} \right) \delta\alpha_i^2 + \frac{P}{\alpha_{x0} \alpha_{y0} \alpha_{z0}} \left(\frac{\delta\alpha_x \delta\alpha_y}{\alpha_{x0} \alpha_{y0}} + \frac{\delta\alpha_y \delta\alpha_z}{\alpha_{y0} \alpha_{z0}} + \frac{\delta\alpha_z \delta\alpha_x}{\alpha_{z0} \alpha_{x0}} \right). \quad (7.93)$$

Wir beschränken uns im folgenden auf eine axialsymmetrische Falle

$$\lambda_x = \lambda_y = 1, \quad \lambda_z = \lambda \quad (7.94)$$

und auf eine repulsive Wechselwirkung ($P > 0$). Mit Hilfe von

$$\alpha_{x0} = \alpha_{y0} = \alpha_0 \quad (7.95)$$

reduzieren sich die algebraischen Gleichungen (7.87)–(7.89) für die Gleichgewichtslagen auf

$$\alpha_0^4 = 1 + \frac{P}{\alpha_{z0}}, \quad (7.96)$$

$$\lambda^2 \alpha_{z0}^4 = 1 + \frac{P \alpha_{z0}}{\alpha_0^2}. \quad (7.97)$$

Außerdem vereinfacht sich das effektive Potential (7.93) zu

$$V_{\text{eff}}(\alpha_0 + \delta\alpha_x, \alpha_0 + \delta\alpha_y, \alpha_{z0} + \delta\alpha_z) = V_{\text{eff}}(\alpha_0, \alpha_0, \alpha_{z0}) + \frac{1}{2} \delta\alpha^T M \delta\alpha \quad (7.98)$$

mit $\delta\alpha^T = (\delta\alpha_x, \delta\alpha_y, \delta\alpha_z)$ und der Matrix

$$M = \begin{pmatrix} 1 + \frac{3}{\alpha_0^4} + \frac{2P}{\alpha_0^4 \alpha_{z0}} & \frac{P}{\alpha_0^4 \alpha_{z0}} & \frac{P}{\alpha_0^3 \alpha_{z0}^2} \\ \frac{P}{\alpha_0^4 \alpha_{z0}} & 1 + \frac{3}{\alpha_0^4} + \frac{2P}{\alpha_0^4 \alpha_{z0}} & \frac{P}{\alpha_0^3 \alpha_{z0}^2} \\ \frac{P}{\alpha_0^3 \alpha_{z0}^2} & \frac{P}{\alpha_0^3 \alpha_{z0}^2} & \lambda^2 + \frac{3}{\alpha_{z0}^4} + \frac{2P}{\alpha_0^2 \alpha_{z0}^3} \end{pmatrix}. \quad (7.99)$$

Demnach beschreibt (7.98) gekoppelte Schwingungen der Auslenkungen $\delta\alpha_x, \delta\alpha_y, \delta\alpha_z$. Deren Eigenfrequenzen ergeben sich aus den Eigenwerten der Matrix (7.99). Unter Berücksichtigung der

Gleichgewichtslagen (7.96), (7.97) lauten die Eigenfrequenzen:

$$\Omega_a = 2\omega \sqrt{1 - \frac{P}{2\alpha_0^4 \alpha_{z0}}}, \quad (7.100)$$

$$\Omega_{b,c} = 2\omega \left\{ \frac{1}{2} \left(1 + \lambda^2 - \frac{P}{4\alpha_0^2 \alpha_{z0}^3} \right) \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left(1 - \lambda^2 + \frac{P}{4\alpha_0^2 \alpha_{z0}^3} \right)^2 + \frac{P^2}{2\alpha_0^6 \alpha_{z0}^4}} \right\}^{1/2}. \quad (7.101)$$

Die dazugehörigen Eigenmoden entsprechen Quadrupolschwingungen des Kondensates (vgl. Fig. 1 in [43]).

Im Limes $P \rightarrow \infty$ vereinfachen sich die Ergebnisse. So erhalten wir aus den Ruhelagen (7.96), (7.97)

$$P = \alpha_0^4 \alpha_{z0}, \quad \alpha_0^2 = \lambda^2 \alpha_{z0}^2, \quad (7.102)$$

so daß sich die Eigenfrequenzen (7.100), (7.101) reduzieren auf

$$\Omega_a = \sqrt{2}\omega, \quad (7.103)$$

$$\Omega_{b,c} = \frac{\omega}{\sqrt{2}} \left\{ 4 + 3\lambda^2 \pm \sqrt{16 - 16\lambda^2 + 9\lambda^4} \right\}^{1/2}. \quad (7.104)$$

Es handelt sich hierbei um Ergebnisse, die sich im Rahmen einer Thomas-Fermi-Theorie ableiten lassen [41]. Im isotropen Grenzfall $\lambda = 1$ vereinfacht sich schließlich (7.104) auf

$$\Omega_b = \sqrt{2}\omega, \quad \Omega_c = \sqrt{5}\omega. \quad (7.105)$$

Der Vergleich von (7.103), (7.105) mit (7.52) zeigt, daß die Eigenfrequenzen der a -/ b -Mode dem Fall $n = 0$, $l = 2$ entsprechen, während die c -Mode dem Fall $n = 1$, $l = 0$ zuzuordnen ist [43].

7.6 Solitonen

Bei der Diskussion der dynamischen Eigenschaften der Kondensate haben wir analytische Resultate bisher nur für kleine Auslenkungen erzielen können. Nichtlineare Effekte haben wir nur mit Hilfe von Näherungsverfahren, wie z.B. der Thomas-Fermi-Näherung, behandeln können. Die zeitabhängige Gross-Pitaevskii-Gleichung (7.1) für das homogene Bose-Gas mit $V(\mathbf{x}) = 0$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{x}, t) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + g|\Psi(\mathbf{x}, t)|^2 \right\} \Psi(\mathbf{x}, t) \quad (7.106)$$

besitzt aber auch exakte analytische Lösungen, die die Form von solitären Wellen bzw. Solitonen besitzen. Es handelt sich dabei um lokale Modulationen des Dichteprofiles, die sich mit konstanter Geschwindigkeit bewegen und dabei ihre Form beibehalten. Die Existenz von Solitonen beruht auf zwei gegensätzlichen physikalischen Effekten, der Dispersion und der Nichtlinearität. Eine Dispersion, wie z.B. die Bogoliubov-Dispersion (6.80), (6.123), führt dazu, daß die einzelnen Wellen

in einem Wellenpaket auseinanderlaufen. Eine Nichtlinearität kann eine solche Dispersion gerade kompensieren, so daß ein Soliton entsteht.

Im folgenden werden wir uns auf eindimensionale Lösungen beschränken, bei denen die Kondensatwellenfunktion nur von der Koordinate x und der Zeit t abhängt. Dadurch reduziert sich (7.106) auf

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + g|\Psi(x, t)|^2 \Psi(x, t). \quad (7.107)$$

Eine wichtige Lösung von (7.107) lautet

$$\Psi(x, t) = \psi_0 \tanh\left(\frac{x}{\xi}\right) e^{-i\mu t/\hbar}, \quad (7.108)$$

wobei das chemische Potential μ und die Kohärenzlänge ξ gegeben sind durch

$$\mu = g\psi_0^2, \quad \xi = \sqrt{\frac{\hbar^2}{Mg\psi_0^2}}. \quad (7.109)$$

Es handelt sich bei (7.108) um eine statische Lösung, da die entsprechende Dichte

$$n(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 = \psi_0^2 \tanh^2 \frac{x}{\xi} \quad (7.110)$$

nicht von der Zeit t abhängt. Die Lösung entspricht daher einem Soliton mit der Geschwindigkeit $v = 0$. Wir beobachten, daß die Dichte (7.110) am Ursprung auf $n_{\min} = 0$ abfällt. Daher bezeichnet man (7.110) als dunkles Soliton. Charakteristisch für die Lösung (7.108) ist auch deren Eigenschaft, daß die Phase an der Stelle $x = 0$ unstetig um $\Delta\varphi = \pi$ springt. Deshalb bezeichnet man (7.108) auch als Kink-Lösung.

Eine Solitonenlösung der zeitabhängigen Gross-Pitaevskii-Gleichung (7.107), die sich mit der Geschwindigkeit v bewegt, lautet

$$\Psi(x, t) = \psi_0 \left\{ i\frac{v}{c} + \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \tanh\left[\frac{x - vt}{\xi} \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}\right] \right\} e^{-i\mu t/\hbar}. \quad (7.111)$$

Hierbei sind die Parameter μ und ξ wieder durch (7.109) gegeben, und die Ausbreitungsgeschwindigkeit c ist

$$c = \sqrt{\frac{g\psi_0^2}{M}}. \quad (7.112)$$

Wir lesen aus (7.111) ab, daß das Dichteprofil

$$n(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 = \psi_0^2 \left\{ \frac{v^2}{c^2} + \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right) \tanh^2\left[\frac{x - vt}{\xi} \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}\right] \right\} \quad (7.113)$$

ein Minimum im Zentrum des Solitons besitzt:

$$n_{\min} = \psi_0^2 \frac{v^2}{c^2}. \quad (7.114)$$

Für ein Soliton, das sich mit der Geschwindigkeit $0 < |v| < c$ bewegt, gilt die Ungleichung

$$0 < n_{\min} < \psi_0^2 = \lim_{x \rightarrow \pm\infty} n(x, t), \quad (7.115)$$

weshalb es auch als graues Soliton bezeichnet wird. Außerdem ist bemerkenswert, daß die Lösung (7.113) die effektive Kohärenzlänge

$$\xi_{\text{eff}} = \frac{\xi}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (7.116)$$

besitzt. Das bedeutet für Geschwindigkeiten $0 < |v| < c$, daß die effektive Kohärenzlänge durch $\xi < \xi_{\text{eff}} < \infty$ gegeben ist. Wir beobachten, daß sich die Phase des grauen Solitons (7.113) um

$$\Delta\varphi = 2 \arccos \frac{v}{c} \quad (7.117)$$

ändert, wenn x von $-\infty$ bis $+\infty$ läuft.

Die bisher diskutierten grauen Solitonen existieren nur für repulsive Wechselwirkung ($g > 0$). Ist dagegen die Wechselwirkung attraktiv ($g < 0$), dann besitzt die zeitabhängige Gross-Pitaevskii-Gleichung (7.107) auch die Solitonen

$$\Psi(x, t) = \frac{\psi_0}{\cosh x/\xi} e^{-i\mu t/\hbar} \quad (7.118)$$

mit den Parametern

$$\mu = -\frac{1}{2} |g| \psi_0^2, \quad \xi = \sqrt{\frac{\hbar^2}{M|g|\psi_0^2}}. \quad (7.119)$$

Sie haben die Eigenschaft, daß sie am Ursprung eine maximale Dichte aufweisen und werden deshalb als helle Solitonen bezeichnet. Auch hier beschreibt (7.118) ein ruhendes Soliton, zu dem es entsprechende Solitonen gibt, die sich mit einer endlichen Geschwindigkeit v bewegen.

Kapitel 8

Superfluidität

8.1 Bewegte Kondensate

Viele Konzepte, die heutzutage zur Beschreibung von Quantengasen verwendet werden, wurden ursprünglich im Zusammenhang mit flüssigem ^4He entwickelt. Die Heliumflüssigkeit ist eine Ausnahme von der Regel, daß Flüssigkeiten durch genügend starkes Abkühlen in den festen Aggregatzustand übergehen. Aufgrund der geringen Masse der Helium-Atome sind deren Nullpunktschwingungen so groß, daß sie bei Normaldruck die Tendenz zur Kristallisation überkompensieren. Unterhalb von $T_c^{(\text{exp})} \approx 2.18 \text{ K}$, des sogenannten λ -Punktes, geht das flüssige ^4He in eine neue superfluide Phase über, die sich durch viele bemerkenswerte Eigenschaften auszeichnet. Zum einen besitzt ein Superfluid die Fähigkeit, reibungsfrei durch dünne Röhren zu fließen. Zum anderen treten Wirbel auf, deren Zirkulation in Einheiten von $2\pi\hbar/M$ quantisiert ist.

Um das Auftreten eines reibungsfreien Flusses zu beschreiben, haben Landau und Tisza das Zwei-Komponenten-Modell der Hydrodynamik entwickelt. Demnach besteht die Flüssigkeit aus einer normal- und einer superfluiden Komponente, die sich gegenseitig durchdringen und deren Dichten von der Temperatur abhängen. Bei sehr tiefen Temperaturen verschwindet die Dichte der normalfluiden Komponente, während die superfluide Komponente gegen die gesamte Dichte der Flüssigkeit strebt. Dies bedeutet aber, daß die superfluide Dichte im allgemeinen von der Kondensatdichte verschieden ist, die bei superfluidem ^4He nur etwa 10 % beträgt. Nahe der Übergangstemperatur des λ -Punktes hat sich die Situation gerade umgekehrt. Dort strebt die superfluide Dichte gegen Null, während die normalfluide Dichte gegen die gesamte Dichte der Flüssigkeit strebt.

Auch Bose-Einstein-Kondensate besitzen die Eigenschaft der Superfluidität. Es ist deshalb naheliegend, das bei ^4He erfolgreiche Zwei-Komponenten-Modell der Hydrodynamik auch auf schwach wechselwirkende Bose-Gase zu übertragen. Deshalb wollen wir nun darauf hinarbeiten, sowohl für die normal- als auch für die superfluide Komponente des Kondensates eine präzise Definition zu entwickeln. Hierzu untersuchen wir zunächst, wie sich eine Galilei-Transformation auf die Beschreibung eines Bose-Gases auswirkt. Der Übergang vom ruhenden Laborsystem mit den Raum-

Zeit-Koordinaten \mathbf{x}, t auf ein dazu mit der Geschwindigkeit \mathbf{u} gleichförmig bewegtes Inertialsystem mit den Raum-Zeit-Koordinaten \mathbf{x}', t' wird durch folgende Galilei-Transformation beschrieben:

$$\mathbf{x}' = \mathbf{x} + \mathbf{u}t, \quad (8.1)$$

$$t' = t. \quad (8.2)$$

Wir werden nun diese Galilei-Transformation auf die Wirkung (7.55), (7.56) eines schwach wechselwirkenden homogenen Bose-Gases an, das sich in Ruhe befindet:

$$\mathcal{A}[\psi^*, \psi] = \int dt \int d^D x \left\{ \psi^*(\mathbf{x}, t) \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2M} \Delta + \mu \right] \psi(\mathbf{x}, t) - \frac{g}{2} \psi^*(\mathbf{x}, t)^2 \psi(\mathbf{x}, t)^2 \right\}. \quad (8.3)$$

Hierbei wirkt sich die Galilei-Transformation (8.1), (8.2) bei den partiellen Ableitungen aufgrund der Kettenregel wie folgt aus

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t'} + \mathbf{u} \nabla', \quad (8.4)$$

$$\nabla = \nabla'. \quad (8.5)$$

Im gleichförmig bewegten Inertialsystem wird das homogene Bose-Gas dann durch Wirkung

$$\mathcal{A}[\psi^*, \psi] = \int dt \int d^D x \left\{ \psi^*(\mathbf{x}, t) \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2M} \Delta + \mu + i\hbar \mathbf{u} \nabla \right] \psi(\mathbf{x}, t) - \frac{g}{2} \psi^*(\mathbf{x}, t)^2 \psi(\mathbf{x}, t)^2 \right\} \quad (8.6)$$

beschrieben, wobei wir die Striche bei den Raum-Zeit-Koordinaten weglassen. Gehen wir von den Bose-Feldern $\psi^*(\mathbf{x}, t), \psi(\mathbf{x}, t)$ zu solchen Bose-Feldern $\psi'^*(\mathbf{x}, t), \psi'(\mathbf{x}, t)$ über, die die relative Geschwindigkeit \mathbf{v} besitzen, so lautet die Transformation

$$\psi'^*(\mathbf{x}, t) = e^{-iM\mathbf{v}\mathbf{x}/\hbar} \psi^*(\mathbf{x}, t), \quad (8.7)$$

$$\psi'(\mathbf{x}, t) = e^{iM\mathbf{v}\mathbf{x}/\hbar} \psi(\mathbf{x}, t). \quad (8.8)$$

In der Tat lesen wir aus (7.13) und (8.8) ab

$$\mathbf{v}'(\mathbf{x}, t) = \frac{\hbar}{M} \nabla \varphi'(\mathbf{x}, t) = \mathbf{v} + \frac{\hbar}{M} \nabla \varphi(\mathbf{x}, t) = \mathbf{v} + \mathbf{v}(\mathbf{x}, t). \quad (8.9)$$

Die Transformation (8.8) bewirkt bei den partielle Ableitungen

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = e^{-iM\mathbf{v}\mathbf{x}/\hbar} \frac{\partial}{\partial t} \psi'(\mathbf{x}, t), \quad (8.10)$$

$$\nabla \psi(\mathbf{x}, t) = e^{-iM\mathbf{v}\mathbf{x}/\hbar} \left\{ -\frac{iM}{\hbar} \mathbf{v} + \nabla \right\} \psi'(\mathbf{x}, t). \quad (8.11)$$

Deshalb ergibt die Einarbeitung von (8.7), (8.8) in (8.6) die Wirkung

$$\begin{aligned} \mathcal{A}[\psi^*, \psi] &= \int dt \int d^D x \left\{ \psi^*(\mathbf{x}, t) \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2M} \Delta + \mu_{\text{eff}} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + i\hbar (\mathbf{u} - \mathbf{v}) \nabla \right] \psi(\mathbf{x}, t) - \frac{g}{2} \psi^*(\mathbf{x}, t)^2 \psi(\mathbf{x}, t)^2 \right\} \end{aligned} \quad (8.12)$$

mit dem effektiven chemischen Potential

$$\mu_{\text{eff}} = \mu + M\mathbf{u}\mathbf{v} - \frac{M}{2} \mathbf{v}^2, \quad (8.13)$$

wobei wir wieder die Striche bei den transformierten Bose-Feldern weglassen.

8.2 Erweiterung der Thermodynamik

Führen wir die Wick-Rotation $t = -i\tau$ durch, so geht aus (8.12) die folgende euklidische Wirkung hervor:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}[\psi^*, \psi] = & \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \left\{ \psi^*(\mathbf{x}, \tau) \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta - \mu_{\text{eff}} \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{\hbar}{i} (\mathbf{u} - \mathbf{v}) \cdot \nabla \right] \psi(\mathbf{x}, \tau) + \frac{g}{2} \psi^*(\mathbf{x}, \tau)^2 \psi(\mathbf{x}, \tau)^2 \right\}. \end{aligned} \quad (8.14)$$

Es stellt sich nun die Frage, wie man die euklidische Wirkung (8.14) eines Bose-Gases, das sich in einem mit der Geschwindigkeit \mathbf{u} gleichförmig bewegten Inertialsystem befindet, im Sinne der Thermodynamik interpretiert. Faßt man die Geschwindigkeit \mathbf{u} als eine thermodynamische Variable auf, so muß es sich um eine intensive Variable handeln. Da das Produkt von intensiver und dazu kanonisch konjugierter Variable die Dimension einer Energie besitzt, muß die zu \mathbf{u} kanonische extensive Variable \mathbf{p} die Dimension eines Impulses haben. Demnach beschreibt \mathbf{p} den Systemimpuls. Da das bewegte Bose-Gas durch ein neues Paar (\mathbf{u}, \mathbf{p}) an thermodynamischen Variablen charakterisiert ist, muß man die Grundrelation für reversible Prozesse (1.16) entsprechend erweitern. Die dort auf der rechten Seite auftretende Änderungen der inneren Energie sind immer von der Form, daß die intensive Variable mit dem totalen Differential der dazu kanonischen extensiven Variablen zu multiplizieren ist. Deshalb erweitern wir (1.16) durch

$$dU = TdS - pdV + \mu dN + \mathbf{u}d\mathbf{p}. \quad (8.15)$$

Dabei beschreibt der neue Term $\mathbf{u}d\mathbf{p}$ diejenige Änderung der inneren Energie, die durch eine Impulsänderung $d\mathbf{p}$ bei der Geschwindigkeit \mathbf{u} hervorgerufen wird.

Wir führen nun eine dreifache Legendre-Transformation der inneren Energie U zur großkanonischen freien Energie \mathcal{F} durch:

$$\mathcal{F} = U - TS - \mu N - \mathbf{u}\mathbf{p}. \quad (8.16)$$

Für deren totales Differential erhalten wir unter Beachtung von (8.15)

$$d\mathcal{F} = -SdT - pdV - Nd\mu - \mathbf{p}d\mathbf{u}, \quad (8.17)$$

d.h. die großkanonische freie Energie \mathcal{F} besitzt die natürlichen Variablen

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}(T, V, \mu, \mathbf{u}). \quad (8.18)$$

Ist dieses thermodynamische Potential (8.18) bekannt, so läßt sich daraus aufgrund von (8.17) der Systemimpuls \mathbf{p} berechnen:

$$\mathbf{p} = - \left. \frac{\partial \mathcal{F}(T, V, \mu, \mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}} \right|_{T, V, \mu}. \quad (8.19)$$

Im folgenden werden wir zeigen, daß der aus (8.19) berechnete Impuls \mathbf{p} eines Bose-Gases für kleine Geschwindigkeiten \mathbf{u} und \mathbf{v} eine Form besitzt, die dem Zwei-Komponenten-Modell der Hydrodynamik entspricht:

$$\mathbf{p} = MV (n_s \mathbf{v} + n_n \mathbf{u} + \dots) . \quad (8.20)$$

Dabei deuten die Punkte an, daß es im Prinzip auch in \mathbf{u} und \mathbf{v} nichtlineare Beiträge zum Systemimpuls \mathbf{p} gibt. Diejenige Dichte n_n , die mit der Systemgeschwindigkeit \mathbf{u} fließt, charakterisiert die normalfluide Dichte. Diejenige Dichte n_s aber, die mit der Kondensatgeschwindigkeit \mathbf{v} fließt, bezeichnet entsprechend die superfluide Dichte. Wir werden später sehen, daß dabei die Summe beider Dichten n_n und n_s gerade die Gesamtdichte n ergibt:

$$n_n + n_s = n . \quad (8.21)$$

8.3 Background-Methode

Wir verwenden nun die Background-Methode von Abschnitt 6.5, um das effektive Potential des bewegten Bose-Gases (8.14) zu berechnen. Da wir unsere Überlegungen nur für das homogene Bose-Gas durchführen, können wir uns dabei von vorneherein auf von Raum und Imaginärzeit unabhängige Background-Felder (6.81) beschränken. Wir zerlegen demnach die Bose-Felder gemäß

$$\psi^*(\mathbf{x}, t) = \Psi^* + \delta\psi^*(\mathbf{x}, t) , \quad \psi(\mathbf{x}, t) = \Psi + \delta\psi(\mathbf{x}, t) . \quad (8.22)$$

Beim Einsetzen von (8.22) in (8.14) berücksichtigen wir entsprechend der Background-Methode nur diejenigen Terme, die in den Fluktuationen $\delta\psi^*(\mathbf{x}, t)$, $\delta\psi(\mathbf{x}, t)$ von nullter und zweiter Ordnung sind. Dadurch erhalten wir

$$\begin{aligned} \mathcal{A}[\Psi^* + \delta\psi^*, \Psi + \delta\psi] = & \hbar\beta V \left(-\mu_{\text{eff}} \Psi^* \Psi + \frac{g}{2} \Psi^{*2} \Psi^2 \right) + \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \left\{ \delta\psi^*(\mathbf{x}, \tau) \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta \right. \right. \\ & \left. \left. - \mu_{\text{eff}} + \frac{\hbar}{i} (\mathbf{u} - \mathbf{v}) \cdot \nabla + 2g \Psi^* \Psi \right] \delta\psi(\mathbf{x}, \tau) + \frac{g}{2} \Psi^{*2} \delta\psi(\mathbf{x}, \tau)^2 + \frac{g}{2} \Psi^2 \delta\psi^*(\mathbf{x}, \tau)^2 \right\} + \dots \end{aligned} \quad (8.23)$$

Nach (6.56), (6.57) und (6.82) ergibt sich das effektive Potential aus

$$e^{-\beta V_{\text{eff}}(\Psi^*, \Psi)} = \oint \mathcal{D}\delta\psi^* \oint \mathcal{D}\delta\psi e^{-\mathcal{A}[\Psi^* + \delta\psi^*, \Psi + \delta\psi]/\hbar} . \quad (8.24)$$

Den führenden Beitrag zum effektiven Potential können wir dann aus (8.23) und (8.24) ablesen:

$$V_{\text{eff}}^{(0)}(\Psi^*, \Psi) = -\mu_{\text{eff}} \Psi^* \Psi V + \frac{g}{2} \Psi^{*2} \Psi^2 V . \quad (8.25)$$

Entsprechend berechnet sich die nächste Ordnung in der Sattelpunktsnäherung zu (8.24)

$$e^{-\beta V_{\text{eff}}^{(1)}(\Psi^*, \Psi)} = \oint \mathcal{D}\delta\psi^* \oint \mathcal{D}\delta\psi e^{-\mathcal{A}^{(2)}[\delta\psi^*, \delta\psi]/\hbar} , \quad (8.26)$$

wobei die Wirkung $\mathcal{A}^{(2)}[\delta\psi^*, \delta\psi]$ gemäß (6.48) alle Beiträge von (8.23) beinhaltet, die quadratisch in den Fluktuationfeldern $\delta\psi^*(\mathbf{x}, t)$, $\delta\psi(\mathbf{x}, t)$ sind. Da wir das homogene Bose-Gas behandeln, ist dabei die 2×2 -Matrix von Integralkernen (6.49) lokal in Raum und Imaginärzeit:

$$G_{\psi^*\psi^*}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\delta(\tau - \tau') \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau'} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta' - \mu_{\text{eff}} + \frac{\hbar}{i}(\mathbf{u} - \mathbf{v}) \nabla' + 2g\Psi^*\Psi \right], \quad (8.27)$$

$$G_{\psi^*\psi}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\delta(\tau - \tau') \left[-\hbar \frac{\partial}{\partial \tau'} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta' - \mu_{\text{eff}} - \frac{\hbar}{i}(\mathbf{u} - \mathbf{v}) \nabla' + 2g\Psi^*\Psi \right], \quad (8.28)$$

$$G_{\psi\psi}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\delta(\tau - \tau') g\Psi^2, \quad (8.29)$$

$$G_{\psi^*\psi^*}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\delta(\tau - \tau') g\Psi^{*2}. \quad (8.30)$$

Führen wir eine Fourier-Transformation und eine Matsubara-Zerlegung wie in (6.89) durch, so lautet die Fourier-Matsubara-Transformierte der 2×2 -Matrix (6.49) mit den Matrixelementen (8.27)–(8.30)

$$G^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m) = \begin{pmatrix} -i\hbar\omega_m + \tilde{\epsilon}(\mathbf{k}) + \hbar\mathbf{k}(\mathbf{u} - \mathbf{v}) & g\Psi^2 \\ g\Psi^{*2} & i\hbar\omega_m + \tilde{\epsilon}(\mathbf{k}) - \hbar\mathbf{k}(\mathbf{u} - \mathbf{v}) \end{pmatrix} \quad (8.31)$$

mit der Dispersion

$$\tilde{\epsilon}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2M} - \mu_{\text{eff}} + 2g\Psi^*\Psi. \quad (8.32)$$

Wir beobachten, daß aufgrund der Geschwindigkeiten \mathbf{u} und \mathbf{v} die Diagonalelemente von (8.31) nicht mehr konjugiert komplex zueinander sind. Für die Determinante der Fourier-Matsubara-Transformierten (8.31) erhalten wir

$$\text{Det } G^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m) = \hbar^2\omega_m^2 + 2i\hbar\mathbf{k}(\mathbf{u} - \mathbf{v})\hbar\omega_m + \tilde{\epsilon}(\mathbf{k})^2 - g^2\Psi^{*2}\Psi^2 - \hbar^2[\mathbf{k}(\mathbf{u} - \mathbf{v})]^2. \quad (8.33)$$

Die aus (8.26) folgende erste Ordnung des effektiven Potentials berechnet sich gemäß (6.99) aus der Determinanten (8.33). Dabei tritt die Matsubara-Reihe

$$S = \frac{1}{2\beta} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \ln(\omega_m^2 + 2ia\omega_m + b^2) \quad (8.34)$$

mit den Parametern

$$a = \mathbf{k}(\mathbf{u} - \mathbf{v}), \quad b = \frac{\tilde{\epsilon}(\mathbf{k})^2 - g^2\Psi^{*2}\Psi^2}{\hbar^2} - [\mathbf{k}(\mathbf{u} - \mathbf{v})]^2 \quad (8.35)$$

auf. Zur Berechnung von (8.34) stellen wir zunächst fest

$$S = \frac{1}{4\beta} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \ln[\omega_m^4 + 2(2a^2 + b^2)\omega_m^2 + b^4], \quad (8.36)$$

so daß wir die beiden Matsubara-Reihen

$$S = \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{2\beta} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \ln \left[\omega_m^2 + \left(\sqrt{a^2 + b^2} + a \right)^2 \right] + \frac{1}{2\beta} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \ln \left[\omega_m^2 + \left(\sqrt{a^2 + b^2} - a \right)^2 \right] \right\} \quad (8.37)$$

erhalten. Beide Reihen entsprechen der Matsubara-Reihe für die freie Energie eines harmonischen Oszillators mit den Frequenzen $\sqrt{a^2 + b^2} \pm a$. Deshalb können wir das Ergebnis der Matsubara-Reihen (8.37) unmittelbar angeben:

$$S = \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{\beta} \ln \left[2 \sinh \frac{\hbar\beta (\sqrt{a^2 + b^2} + a)}{2} \right] + \frac{1}{\beta} \ln \left[2 \sinh \frac{\hbar\beta (\sqrt{a^2 + b^2} - a)}{2} \right] \right\}. \quad (8.38)$$

Aus (6.99), (8.33)–(8.35) und (8.38) lesen wir den Beitrag $V_{\text{eff}}^{(1)}(\Psi^*, \Psi)$ zum effektiven Potential ab:

$$V_{\text{eff}}^{(1)}(\Psi^*, \Psi) = V \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left\{ \frac{E(\mathbf{k})}{2} + \frac{1}{2\beta} \ln [1 - e^{-\beta\{E(\mathbf{k}) + \hbar\mathbf{k}(\mathbf{u}-\mathbf{v})\}}] \right. \\ \left. + \frac{1}{2\beta} \ln [1 - e^{-\beta\{E(\mathbf{k}) - \hbar\mathbf{k}(\mathbf{u}-\mathbf{v})\}}] \right\}. \quad (8.39)$$

Hierbei reduziert sich die Bogoliubov-Dispersion

$$E(\mathbf{k}) = \sqrt{\tilde{\epsilon}(\mathbf{k})^2 - g^2 \Psi^{*2} \Psi^2} \quad (8.40)$$

aufgrund von (8.32) auf

$$E(\mathbf{k}) = \sqrt{\left[\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu_{\text{eff}} + g\Psi^* \Psi \right]^2 + 2 \left[\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu_{\text{eff}} + g\Psi^* \Psi \right] g\Psi^* \Psi}. \quad (8.41)$$

Da die Bogoliubov-Dispersion (8.41) die Symmetrieeigenschaft $E(\mathbf{k}) = E(-\mathbf{k})$ besitzt, läßt sich (8.39) vereinfachen zu

$$V_{\text{eff}}^{(1)}(\Psi^*, \Psi) = V \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left\{ \frac{E(\mathbf{k})}{2} + \frac{1}{\beta} \ln [1 - e^{-\beta\{E(\mathbf{k}) + \hbar\mathbf{k}(\mathbf{u}-\mathbf{v})\}}] \right\}. \quad (8.42)$$

Wir beobachten, daß die Geschwindigkeiten \mathbf{u} , \mathbf{v} zwar keinen Einfluß auf das effektive Potential am absoluten Temperaturnullpunkt $T = 0$ haben. Sie führen aber bei den Quasiteilchen auf die asymmetrische Dispersion

$$E_{\text{ges}}(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k}) + \hbar\mathbf{k}(\mathbf{u} - \mathbf{v}). \quad (8.43)$$

Für kleine Geschwindigkeiten \mathbf{u} und \mathbf{v} können wir (8.42) bis zur zweiten Ordnung Taylor entwickeln. Mit dem Baumgraphen-Resultat (8.25) lautet damit das effektive Potential zunächst:

$$V_{\text{eff}}(\Psi^*, \Psi) = -\mu_{\text{eff}} \Psi^* \Psi V + \frac{g}{2} \Psi^{*2} \Psi^2 V + V \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left\{ \frac{E(\mathbf{k})}{2} + \frac{1}{\beta} \ln [1 - e^{-\beta E(\mathbf{k})}] \right. \\ \left. + \frac{1}{e^{\beta E(\mathbf{k})} - 1} \hbar\mathbf{k}(\mathbf{u} - \mathbf{v}) - \frac{\beta e^{\beta E(\mathbf{k})}}{2 [e^{\beta E(\mathbf{k})} - 1]^2} [\hbar\mathbf{k}(\mathbf{u} - \mathbf{v})]^2 + \dots \right\}. \quad (8.44)$$

Berücksichtigen wir erneut die Symmetrie $E(\mathbf{k}) = E(-\mathbf{k})$ der Bogoliubov-Dispersion (8.41), so verschwindet der in \mathbf{u} , \mathbf{v} lineare Term, und der in \mathbf{u} , \mathbf{v} quadratische Term vereinfacht sich aufgrund

$$\int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} k_i k_j f(|\mathbf{k}|) = \frac{1}{D} \delta_{ij} \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \mathbf{k}^2 f(|\mathbf{k}|). \quad (8.45)$$

Das effektive Potential (8.44) ergibt sich dann zu

$$V_{\text{eff}}(\Psi^*, \Psi) = -\mu_{\text{eff}} \Psi^* \Psi V + \frac{g}{2} \Psi^{*2} \Psi^2 V + \eta V \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left\{ \frac{E(\mathbf{k})}{2} + \frac{1}{\beta} \ln [1 - e^{-\beta E(\mathbf{k})}] - \frac{\beta \hbar^2 \mathbf{k}^2 e^{\beta E(\mathbf{k})}}{2D [e^{\beta E(\mathbf{k})} - 1]^2} (\mathbf{u} - \mathbf{v})^2 + \dots \right\}. \quad (8.46)$$

Hierbei haben wir wieder den Kleinheitsparameter η eingeführt, um formal den \hbar^0 - und den \hbar^1 -Beitrag zum effektiven Potential zu unterscheiden.

8.4 Superfluide Dichte

Die Extremalisierung von (8.46) bezüglich der Background-Felder

$$\frac{\partial V_{\text{eff}}(\Psi^*, \Psi)}{\partial \Psi^*} = 0, \quad \frac{\partial V_{\text{eff}}(\Psi^*, \Psi)}{\partial \Psi} = 0 \quad (8.47)$$

führt mit (8.13) auf die Kondensatdichte

$$\Psi^* \Psi = \frac{\mu}{g} + \mathcal{O}(\eta, \mathbf{u}, \mathbf{v}) \quad (8.48)$$

und die Dispersion

$$E(\mathbf{k}) = \sqrt{\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M}\right)^2 + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{M} \mu} + \mathcal{O}(\eta, \mathbf{u}, \mathbf{v}). \quad (8.49)$$

Werten wir das effektive Potential (8.46) am Extremum (8.48) aus, so erhalten wir die großkanonische freie Energie

$$\mathcal{F} = V_{\text{eff}}(\Psi^*, \Psi). \quad (8.50)$$

Eine Differentiation nach dem chemischen Potential μ führt aufgrund von (8.13) zur Teilchendichte

$$n = -\frac{1}{V} \left\{ \frac{\partial V_{\text{eff}}(\Psi^*, \Psi)}{\partial \mu_{\text{eff}}} + \frac{\partial V_{\text{eff}}(\Psi^*, \Psi)}{\partial \Psi^*} \frac{\partial \Psi^*}{\partial \mu_{\text{eff}}} + \frac{\partial V_{\text{eff}}(\Psi^*, \Psi)}{\partial \Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial \mu_{\text{eff}}} \right\}. \quad (8.51)$$

Dabei vereinfacht sich (8.51) aufgrund von (8.47) zu

$$n = -\frac{1}{V} \frac{\partial V_{\text{eff}}(\Psi^*, \Psi)}{\partial \mu_{\text{eff}}}. \quad (8.52)$$

Um nun den Systemimpuls \mathbf{p} gemäß (8.19) berechnen zu können, müssen wir die Abhängigkeit der großkanonischen freien Energie (8.50) von der Geschwindigkeit \mathbf{u} untersuchen. Zunächst stellen wir fest, daß das effektive Potential (8.46) eine explizite Abhängigkeit von der Geschwindigkeit \mathbf{u} besitzt. Darüber hinaus liegt aber auch eine implizite Abhängigkeit über das effektive chemische Potential (8.13) vor mit

$$\frac{\partial \mu_{\text{eff}}}{\partial \mathbf{u}} = M \mathbf{v} \quad (8.53)$$

und über das Extremum (8.48) vor. Damit ergibt sich der Systemimpuls (8.19) zu

$$\mathbf{p} = - \left\{ \frac{\partial V_{\text{eff}}(\Psi^*, \Psi)}{\partial \mathbf{u}} + \frac{\partial V_{\text{eff}}(\Psi^*, \Psi)}{\partial \mu_{\text{eff}}} \frac{\partial \mu_{\text{eff}}}{\partial \mathbf{u}} + \frac{\partial V_{\text{eff}}(\Psi^*, \Psi)}{\partial \Psi^*} \frac{\partial \Psi^*}{\partial \mathbf{u}} + \frac{\partial V_{\text{eff}}(\Psi^*, \Psi)}{\partial \Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{u}} \right\}, \quad (8.54)$$

was sich aufgrund von (8.46), (8.47), (8.52) und (8.53) vereinfacht:

$$\mathbf{p} = MVn\mathbf{v} + \frac{\hbar^2 \beta V}{D} \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{\mathbf{k}^2 e^{\beta E(\mathbf{k})}}{[e^{\beta E(\mathbf{k})} - 1]^2} (\mathbf{u} - \mathbf{v}) + \dots \quad (8.55)$$

Demnach ist (8.55) von der Form (8.20), wobei die superfluide Dichte n_s und die normalfluide Dichte

$$n_n = \frac{\hbar^2 \beta}{DM} \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{\mathbf{k}^2 e^{\beta E(\mathbf{k})}}{[e^{\beta E(\mathbf{k})} - 1]^2} \quad (8.56)$$

zusammen gerade die Gesamtdichte (8.21) ergeben. Am absoluten Temperaturnullpunkt $T = 0$ folgt aus (8.56)

$$\lim_{T \rightarrow 0} n_n = 0, \quad (8.57)$$

so daß die superfluide Dichte der Gesamtdichte entspricht:

$$\lim_{T \rightarrow 0} n_s = n. \quad (8.58)$$

Während also die Kondensatdichte aufgrund der 2-Teilchen-Wechselwirkung gemäß (6.139) entleert wird, tragen alle Bosonen zur Superfluidität bei. Dies kann man sich nur dadurch erklären, daß die thermisch angeregten Bosonen vom Kondensat zu einer reibungsfreien Strömung mitgerissen werden. Dies bedeutet zwar, daß das Auftreten von Superfluidität mit der Existenz des Kondensates als einem makroskopisch besetzten Quantenzustand eng verbunden ist. Man darf aber die superfluide Dichte nicht mit der Kondensatdichte identifizieren. Es handelt sich dabei um zwei physikalisch vollkommen verschiedene Größen.

Ein weiterer Unterschied zwischen superfluider Dichte n_s und Kondensatdichte n_0 besteht in ihrer Temperaturabhängigkeit in der Nähe des absoluten Temperaturnullpunktes $T = 0$. Wir betrachten zunächst die normalfluide Dichte (8.56) und erhalten mit Hilfe von (6.135)

$$n_n = \frac{\beta}{\Gamma(D/2 + 1)} \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2} \right)^{D/2} \int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon^{D/2} e^{\beta\sqrt{\epsilon^2 + 2\epsilon\mu}}}{[e^{\beta\sqrt{\epsilon^2 + 2\epsilon\mu}} - 1]^2}. \quad (8.59)$$

Durch die Substitution $x(\epsilon) = \sqrt{2\beta^2\mu\epsilon}$ geht (8.59) über in

$$n_n = \frac{1}{\Gamma(D/2 + 1)\beta^{D+1}2^{D/2}\mu^{D/2+1}} \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2} \right)^{D/2} \int_0^\infty dx \frac{x^{D+1} e^{\sqrt{x^2 + x^4/4\beta^2\mu^2}}}{[e^{\sqrt{x^2 + x^4/4\beta^2\mu^2}} - 1]^2}, \quad (8.60)$$

so daß sich im Limes $\beta \rightarrow \infty$ ergibt

$$n_n = \frac{1}{\Gamma(D/2 + 1)\beta^{D+1}2^{D/2}\mu^{D/2+1}} \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2} \right)^{D/2} \int_0^\infty dx \frac{x^{D+1} e^x}{[e^x - 1]^2} + \dots \quad (8.61)$$

Der Vergleich von (8.59) mit (8.61) zeigt, daß der im Limes $\beta \rightarrow \infty$ dominante Beitrag zur normalfluiden Dichte dadurch entsteht, daß die Bogoliubov-Dispersion (8.49) durch die Phononen-Dispersion (6.125) angenähert wird. Beachten wir die Reihendarstellung

$$\frac{e^x}{[e^x - 1]^2} = \sum_{n=1}^{\infty} n e^{-nx}, \quad (8.62)$$

und die Bogoliubov-Geschwindigkeit (7.31), so läßt sich (8.61) auswerten:

$$n_n = \frac{\Gamma(D+2)\zeta(D+1)(k_B T)^{D+1}}{\Gamma(D/2+1)2^D \pi^{D/2} M \hbar^D c^{D+2}} + \dots \quad (8.63)$$

In $D = 3$ Dimensionen lautet demnach die superfluide Dichte n_s unter Beachtung von $\zeta(4) = \pi^4/90$ und von (8.21):

$$n_s = n - \frac{2\pi^2(k_B T)^4}{45M\hbar^3 c^5} + \dots \quad (8.64)$$

In entsprechender Weise untersuchen wir die thermische Entleerung der Kondensatdichte, die sich aus (6.122) ablesen läßt:

$$\Delta n_0(T) = - \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2M + \mu}{E(\mathbf{k}) [e^{\beta E(\mathbf{k})} - 1]}. \quad (8.65)$$

Dabei erhalten wir für (8.65) die folgende Integraldarstellung:

$$\begin{aligned} \Delta n_0(T) &= - \frac{1}{\Gamma(D/2)\beta^{D-1}2^{D/2-1}\mu^{D/2-1}} \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2} \right)^{D/2} \\ &\times \int_0^\infty dx \frac{x^{D-2} [1 + x^2/2\beta^2\mu^2]}{\sqrt{1 + x^2/4\beta^2\mu^2} [e^{\sqrt{x^2+x^4/4\beta^2\mu^2}} - 1]}, \end{aligned} \quad (8.66)$$

Wir führen nun den Limes $\beta \rightarrow \infty$ durch und berücksichtigen dabei die ersten beiden Terme

$$\begin{aligned} \Delta n_0(T) &= - \frac{1}{\Gamma(D/2)\beta^{D-1}2^{D/2-1}\mu^{D/2-1}} \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2} \right)^{D/2} \\ &\times \int_0^\infty dx \left\{ \frac{x^{D-2}}{e^x - 1} + \frac{3x^D}{8\beta^2\mu^2 [e^x - 1]} - \frac{x^{D+1}e^x}{8\beta^2\mu^2 [e^x - 1]^2} + \dots \right\}. \end{aligned} \quad (8.67)$$

Die verbleibenden x -Integrale lassen sich wieder durch die Riemannsche Zeta-Funktion ausdrücken. Unter Berücksichtigung von (7.31) erhalten wir

$$\begin{aligned} \Delta n_0(T) &= - \frac{M(k_B T)^{D-1}}{\Gamma(D/2)2^{D-1}\pi^{D/2}\hbar^D c^{D-2}} \left\{ \Gamma(D-1)\zeta(D-1) \right. \\ &\quad \left. - \frac{(2D-1)\Gamma(D+1)\zeta(D+1)(k_B T)^2}{8c^4 M^2} + \dots \right\}. \end{aligned} \quad (8.68)$$

In $D = 3$ Raumdimensionen lautet demnach die Kondensatdichte mit (6.141) und $\zeta(2) = \pi^2/6$:

$$n_0 = n - \frac{8}{3\sqrt{\pi}} (an)^{3/2} - \frac{(k_B T)^2 M}{12\hbar^3 c} + \frac{\pi^2 (k_B T)^4}{240\hbar^3 c^5 M} + \dots \quad (8.69)$$

Der Vergleich von (8.69) mit (4.223) zeigt, daß die 2-Teilchen-Wechselwirkung die Temperaturabhängigkeit der Kondensatdichte verändert. Während beim wechselwirkungsfreien Bose-Gas die thermische Entleerung am absoluten Temperaturnullpunkt $T = 0$ mit $T^{3/2}$ erfolgt, wird das schwach wechselwirkende Bose-Gas mit T^2 entleert.

8.5 Landau-Kriterium

Wir untersuchen nun die physikalische Ursache für das Auftreten einer reibungsfreien Strömung. Hierzu betrachten wir einen makroskopischen Körper der Masse M , der sich mit der Geschwindigkeit \mathbf{V} durch eine Flüssigkeit bewegt. Der Impuls des Körpers beträgt dann $M\mathbf{V}$ und seine kinetische Energie lautet $M\mathbf{V}^2/2$. Wir nehmen nun an, daß durch diese Bewegung des Körpers in der Flüssigkeit ein Quasiteilchen mit Wellenvektor \mathbf{k} angeregt wird. Der Impuls des Quasiteilchens beträgt dann $\hbar\mathbf{k}$ und seine Energie wird durch eine Dispersion $E(\mathbf{k})$ beschrieben. Nach der Anregung des Quasiteilchens bewege sich der makroskopische Körper mit der Geschwindigkeit \mathbf{V}' , so daß dessen Impuls $M\mathbf{V}'$ beträgt und seine kinetische Energie lautet $M\mathbf{V}'^2/2$. Wir stellen für diesen Prozeß die Impulserhaltung

$$M\mathbf{V} = M\mathbf{V}' + \hbar\mathbf{k} \quad (8.70)$$

und die Energieerhaltung

$$\frac{1}{2}M\mathbf{V}^2 = \frac{1}{2}M\mathbf{V}'^2 + E(\mathbf{k}) \quad (8.71)$$

auf. Aus (8.70) lesen wir ab

$$\frac{1}{2}M\mathbf{V}'^2 = \frac{1}{2}M\mathbf{V}^2 - \hbar\mathbf{k}\mathbf{V} + \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2M}, \quad (8.72)$$

so daß wir mit Hilfe von (8.71) das Ergebnis

$$\hbar\mathbf{k}\mathbf{V} = E(\mathbf{k}) + \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2M} \quad (8.73)$$

erhalten. Wir leiten hieraus für den Betrag $V = |\mathbf{V}|$ der Geschwindigkeit \mathbf{V} des makroskopischen Körpers folgende Ungleichung ab:

$$\hbar|\mathbf{k}|V \geq \hbar\mathbf{k}\mathbf{V} = E(\mathbf{k}) + \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2M} \geq E(\mathbf{k}). \quad (8.74)$$

Wir fragen nun nach der minimalen Geschwindigkeit V_L , bei der es gerade noch möglich ist, ein Quasiteilchen zu erzeugen. Aus (8.74) folgt hierfür

$$V_L = \min_{\mathbf{k}} \frac{E(\mathbf{k})}{\hbar|\mathbf{k}|}. \quad (8.75)$$

Diese kritische Geschwindigkeit wurde erstmalig von Landau abgeleitet. Für Geschwindigkeiten $V > V_L$ können Quasiteilchen erzeugt werden, d.h. die Bewegung des makroskopischen Körpers kann abgebremst werden. Umgekehrt heißt das, daß sich der makroskopische Körper für Geschwindigkeiten $V < V_L$ reibungsfrei in der Flüssigkeit bewegen kann.

Im Falle eines homogenen Bose-Gases mit der Bogoliubov-Dispersion (6.80), (6.123) ergibt sich die kritische Geschwindigkeit (8.75) gerade zur Phononengeschwindigkeit (6.126): $V_L = c$. Bei superfluidem Helium dagegen besitzt die Dispersionsrelation $E(\mathbf{k})$ bei einem von Null verschiedenen

Wellenvektor \mathbf{k} ein Rotonenminimum, so daß dort die kritische Geschwindigkeit V_L kleiner als die Phononengeschwindigkeit c ist. Ein quantitativer Vergleich mit dem Experiment zeigt aber, daß die auf diese Weise gewonnene Landau-Geschwindigkeit V_L bei superfluidem Helium zu groß ist. Bei der Herleitung des Landau-Kriteriums wurde die Ausbildung von Wirbeln vernachlässigt, die zu einer weiteren Verringerung der kritischen Geschwindigkeit führen. Im Falle des wechselwirkungsfreien Bose-Gases mit der Dispersion $E(\mathbf{k}) = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2M$ lesen wir schließlich aus (8.75) ab, daß die kritische Geschwindigkeit verschwindet: $V_L = 0$. Das bedeutet, daß das ideale Bose-Gas keine Superfluidität besitzt. Für das Auftreten von Superfluidität ist es deshalb notwendig, daß eine 2-Teilchen-Wechselwirkung vorliegt.

Kapitel 9

Ungeordnete Bose-Gase

9.1 Zufallspotential

Bisher haben wir das 1-Teilchen-Potential $V(\mathbf{x})$ der Bosonen als ein von Außen fest vorgegebenes Fallenpotential angesehen. Nun wollen wir eine andere physikalische Situation betrachten, bei der das 1-Teilchen-Potential $V(\mathbf{x})$ an jedem Raumpunkt \mathbf{x} fluktuiert. Ein solches Zufallspotential $V(\mathbf{x})$ dient beispielsweise dazu, die ungeordnete Bewegung von superfluidem Helium in porösen Medien zu modellieren [44]. Dabei nehmen wir an, daß die Poren als lokale Streuzentren statistisch so verteilt sind, daß der Erwartungswert des Zufallspotentials verschwindet

$$\langle V(\mathbf{x}_1) \rangle = 0 \quad (9.1)$$

und daß deren Korrelationsfunktion von der Differenz der Raumpunkte abhängt

$$\langle V(\mathbf{x}_1)V(\mathbf{x}_2) \rangle = R(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2). \quad (9.2)$$

Verwendet man eine Gaußsche Korrelationsfunktion

$$R(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) = R_0 \frac{e^{-(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)^2/2\xi^2}}{(2\pi\xi^2)^{D/2}}, \quad (9.3)$$

so kann man die Kohärenzlänge ξ mit der mittleren Ausdehnung einer Pore identifizieren [45]. Im folgenden sind wir aber nicht an einem quantitativen Modell für experimentelle Meßergebnisse interessiert, und werden daher die Ausdehnung der Poren vernachlässigen. Ein solches qualitatives Modell für ein ungeordnetes Bose-System erhalten wir, wenn wir in (9.3) den Limes einer verschwindenden Kohärenzlänge $\xi \rightarrow 0$ betrachten und uns auf eine δ -Korrelation

$$R(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) = R_0 \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \quad (9.4)$$

beschränken. Dabei ist der Parameter R_0 proportional zur Dichte der Poren und stellt daher ein Maß für die Stärke der Unordnung dar.

Wir wenden uns nun der Wahrscheinlichkeitsverteilung $P[V]$ zu, die ein Funktional des Zufallspotentials $V(\mathbf{x})$ darstellt. Hierzu definieren wir Erwartungswerte, wie sie beispielsweise in (9.1) und (9.2) auftreten, durch das Funktionalintegral

$$\langle \bullet \rangle = \int \mathcal{D}V \bullet P[V]. \quad (9.5)$$

Dabei entspricht das Funktionalintegral einem unendlichen Produkt gewöhnlicher Integrale, bei denen an jedem Ort \mathbf{x} über alle möglichen Werte des Zufallspotentials $V(\mathbf{x})$ summiert wird:

$$\int \mathcal{D}V = \prod_{\mathbf{x}} \int_{-\infty}^{\infty} dV(\mathbf{x}). \quad (9.6)$$

Das Funktionalintegralmaß (9.6) ist so zu wählen, daß die Wahrscheinlichkeitsverteilung $P[V]$ der Normierung

$$\int \mathcal{D}V P[V] = 1 \quad \Longrightarrow \quad \langle 1 \rangle = 1 \quad (9.7)$$

genügt. Wir nehmen nun an, daß es sich bei $P[V]$ um eine Gaußsche Wahrscheinlichkeitsverteilung handelt. Dann ist diese durch die beiden Erwartungswerte (9.1) und (9.2) eindeutig festgelegt durch

$$P[V] = \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int d^D x \int d^D x' R^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') V(\mathbf{x}) V(\mathbf{x}') \right\}, \quad (9.8)$$

wobei der Integralkern $R^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ zur Korrelationsfunktion (9.3) funktional invers ist:

$$\int d^D x R^{-1}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}) R(\mathbf{x} - \mathbf{x}_2) = \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2). \quad (9.9)$$

Beispielsweise erhalten wir für die δ -Korrelation (9.4) aus (9.9) den Integralkern

$$R^{-1}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) = \frac{1}{R_0} \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2). \quad (9.10)$$

Wir sind daran interessiert, die Momente der Wahrscheinlichkeitsverteilung (9.8) zu berechnen. Hierzu betrachten wir das erzeugende Funktional

$$I[j] = \left\langle \exp \left\{ \int d^D x j(\mathbf{x}) V(\mathbf{x}) \right\} \right\rangle \quad (9.11)$$

mit dem Hilfsfeld $j(\mathbf{x})$, für das sich nach (9.5) und (9.8) ein Gaußsches Funktionalintegral ergibt:

$$I[j] = \int \mathcal{D}V \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int d^D x \int d^D x' R^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') V(\mathbf{x}) V(\mathbf{x}') + \int d^D x j(\mathbf{x}) V(\mathbf{x}) \right\}. \quad (9.12)$$

Das Ergebnis von (9.12) lautet unter Beachtung der Normierung (9.7):

$$I[j] = \exp \left\{ \frac{1}{2} \int d^D x \int d^D x' R(\mathbf{x} - \mathbf{x}') j(\mathbf{x}) j(\mathbf{x}') \right\}. \quad (9.13)$$

Die einzelnen Momente der Wahrscheinlichkeitsverteilung (9.8) lassen sich durch Funktionalableitungen des erzeugenden Funktionales (9.11) bezüglich des Hilfsfeldes $j(\mathbf{x})$ berechnen. So folgt für das erste Moment

$$\langle V(\mathbf{x}_1) \rangle = \int \mathcal{D}V V(\mathbf{x}_1) \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int d^D x \int d^D x' R^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') V(\mathbf{x}) V(\mathbf{x}') \right\} \quad (9.14)$$

und für das zweite Moment

$$\langle V(\mathbf{x}_1)V(\mathbf{x}_2) \rangle = \int \mathcal{D}V V(\mathbf{x}_1)V(\mathbf{x}_2) \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int d^D x \int d^D x' R^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') V(\mathbf{x})V(\mathbf{x}') \right\} \quad (9.15)$$

unter Beachtung von (9.12):

$$\langle V(\mathbf{x}_1) \rangle = \left. \frac{\delta I[j]}{\delta j(\mathbf{x}_1)} \right|_{j(\mathbf{x})=0}, \quad (9.16)$$

$$\langle V(\mathbf{x}_1)V(\mathbf{x}_2) \rangle = \left. \frac{\delta^2 I[j]}{\delta j(\mathbf{x}_1)\delta j(\mathbf{x}_2)} \right|_{j(\mathbf{x})=0}. \quad (9.17)$$

Einsetzen von (9.13) in (9.16), (9.17) führt dann tatsächlich auf (9.1), (9.2). In entsprechender Weise lassen sich auch höhere Korrelationsfunktionen berechnen. Dabei verschwinden die Korrelationsfunktionen mit einem ungeraden Produkt an Zufallspotentialen, während diejenigen mit einem geraden Produkt an Zufallspotentialen durch die Wick-Regel bestimmt werden. So gilt beispielsweise

$$\begin{aligned} \langle V(\mathbf{x}_1)V(\mathbf{x}_2)V(\mathbf{x}_3)V(\mathbf{x}_4) \rangle &= R(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)R(\mathbf{x}_3 - \mathbf{x}_4) \\ &+ R(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_3)R(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_4) + R(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_4)R(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_3). \end{aligned} \quad (9.18)$$

9.2 Replika-Methode

Wir untersuchen nun die thermodynamischen Eigenschaften eines ungeordneten homogenen Bose-Gases. Hierzu stellen wir zunächst fest, daß die großkanonische Zustandssumme

$$\mathcal{Z} = \oint \mathcal{D}\psi^* \oint \mathcal{D}\psi e^{-\mathcal{A}[\psi^*, \psi]/\hbar} \quad (9.19)$$

mit der euklidischen Wirkung

$$\begin{aligned} \mathcal{A}[\psi^*, \psi] &= \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \left\{ \psi^*(\mathbf{x}, \tau) \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + V(\mathbf{x}) - \mu \right] \psi(\mathbf{x}, \tau) + \frac{g}{2} \psi^*(\mathbf{x}, \tau)^2 \psi(\mathbf{x}, \tau)^2 \right\} \end{aligned} \quad (9.20)$$

ein Funktional des Zufallspotentials $V(\mathbf{x})$ darstellt. Die großkanonische freie Energie berechnet sich dann über den Erwartungswert

$$\mathcal{F} = -\frac{1}{\beta} \langle \ln \mathcal{Z} \rangle. \quad (9.21)$$

Im allgemeinen ist es nicht möglich, den Ausdruck (9.21) explizit auszuwerten, da die Mittelung über das Zufallspotential $V(\mathbf{x})$ und die nichtlineare Funktion des Logarithmus nicht miteinander vertauschen:

$$\langle \ln \mathcal{Z} \rangle \neq \ln \langle \mathcal{Z} \rangle. \quad (9.22)$$

Eine wichtige Methode, die durch (9.21) vorgeschriebene Mittelung durchzuführen, besteht darin, die N -fache Potenz der großkanonischen Zustandssumme \mathcal{Z} im Limes $N \rightarrow 0$ zu untersuchen. Aus

$$\mathcal{Z}^N = e^{N \ln \mathcal{Z}} = 1 + N \ln \mathcal{Z} + \dots \quad (9.23)$$

folgt nämlich für die großkanonische freie Energie (9.21):

$$\mathcal{F} = -\frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow 0} \frac{\langle \mathcal{Z}^N \rangle - 1}{N}. \quad (9.24)$$

Durch N -fache Replizierung des homogenen Bose-Gases (9.19) erhalten wir

$$\mathcal{Z}^N = \left\{ \prod_{\alpha=1}^N \oint \mathcal{D}\psi_{\alpha}^* \oint \mathcal{D}\psi_{\alpha} \right\} e^{-\mathcal{A}^{(N)}[\psi^*, \psi]/\hbar} \quad (9.25)$$

mit der euklidischen Wirkung

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^{(N)}[\psi^*, \psi] = & \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \sum_{\alpha=1}^N \left\{ \psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta \right. \right. \\ & \left. \left. + V(\mathbf{x}) - \mu \right] \psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) + \frac{g}{2} \psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau)^2 \psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau)^2 \right\}. \end{aligned} \quad (9.26)$$

Die Mittelung über das Zufallspotential $V(\mathbf{x})$ führt dann (9.25), (9.26) über in

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{Z}^N \rangle = & \left\{ \prod_{\alpha=1}^N \oint \mathcal{D}\psi_{\alpha}^* \oint \mathcal{D}\psi_{\alpha} \right\} \exp \left\{ \frac{-1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \sum_{\alpha=1}^N \left[\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \left(\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta - \mu \right) \right. \right. \\ & \left. \left. \times \psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) + \frac{g}{2} \psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau)^2 \psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau)^2 \right] \right\} \left\langle \exp \left\{ \int d^D x \frac{-1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \sum_{\alpha=1}^N \psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) V(\mathbf{x}) \right\} \right\rangle. \end{aligned} \quad (9.27)$$

Der Vergleich von (9.11) mit (9.27) zeigt, daß die Mittelung über das Zufallspotential $V(\mathbf{x})$ gerade auf das erzeugende Funktional (9.13) mit dem Hilfsfeld

$$j(\mathbf{x}) = \frac{-1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \sum_{\alpha=1}^N \psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \quad (9.28)$$

führt. Demnach wird das ungeordnete Bose-System durch die Replika-Wirkung

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^{(N)}[\psi^*, \psi] = & \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \sum_{\alpha=1}^N \left\{ \psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta - \mu \right] \psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) + \frac{g}{2} \psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau)^2 \psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau)^2 \right\} \\ & - \frac{1}{2\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x \int d^D x' \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\alpha'=1}^N R(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') \end{aligned} \quad (9.29)$$

beschrieben. Im Falle der δ -Korrelation (9.4) reduziert sich (9.29) auf

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^{(N)}[\psi^*, \psi] = & \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \sum_{\alpha=1}^N \left\{ \psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta - \mu \right] \psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) + \frac{g}{2} \psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau)^2 \psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau)^2 \right\} \\ & - \frac{R_0}{2\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\alpha'=1}^N \psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}, \tau') \psi_{\alpha'}(\mathbf{x}, \tau'). \end{aligned} \quad (9.30)$$

Eine δ -korrelierte Unordnung führt demnach zu einer attraktiven Wechselwirkung zwischen den Replika-Feldern $\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau)$, $\psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau)$, die lokal im Raum aber bilokal in der Imaginärzeit ist.

9.3 Background-Methode

Wir entwickeln nun die Bogoliubov-Theorie für das ungeordnete Bose-Gas. Hierzu verwenden wir die Background-Methode, um das effektive Potential zur Replika-Wirkung (9.30) zu berechnen. Da wir unsere Überlegungen für das homogene Bose-Gas durchführen, können wir uns von vorneherein auf von Raum und Imaginärzeit unabhängige Background-Felder beschränken. Wir zerlegen die Replika-Felder $\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau)$, $\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau)$ demnach gemäß

$$\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) = \Psi_\alpha^* + \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau), \quad \psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) = \Psi_\alpha + \delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau). \quad (9.31)$$

Setzen wir diese Zerlegung in die Replika-Wirkung (9.30) ein, so haben wir nach der Background-Methode nur diejenigen Beiträge zu berücksichtigen, die in den Fluktuationfeldern $\delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau)$, $\delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau)$ von nullter und zweiter Ordnung sind:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^{(N)}[\Psi^* + \delta\psi^*, \Psi + \delta\psi] &= \hbar\beta V \sum_{\alpha=1}^N \left(-\mu\Psi_\alpha^*\Psi_\alpha + \frac{g}{2}\Psi_\alpha^{*2}\Psi_\alpha^2 \right) - \frac{R_0}{2}\hbar\beta^2 V \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\alpha'=1}^N \Psi_\alpha^*\Psi_\alpha\Psi_{\alpha'}^*\Psi_{\alpha'} \\ &+ \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \sum_{\alpha=1}^N \left\{ \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \left[\hbar\frac{\partial}{\partial\tau} - \frac{\hbar^2}{2M}\Delta - \mu + 2g\Psi_\alpha^*\Psi_\alpha \right] \delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) + \frac{g}{2}\Psi_\alpha^{*2}\delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau)^2 \right. \\ &+ \left. \frac{g}{2}\Psi_\alpha^2\delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau)^2 \right\} - \frac{R_0}{2\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\alpha'=1}^N \left\{ 2\Psi_{\alpha'}^*\Psi_{\alpha'}\delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau)\delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \right. \\ &+ \Psi_{\alpha'}^*\Psi_{\alpha'}\delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau)\delta\psi_{\alpha'}(\mathbf{x}, \tau') + \Psi_\alpha^*\Psi_{\alpha'}\delta\psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}, \tau')\delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \\ &+ \left. \Psi_\alpha\Psi_{\alpha'}\delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau)\delta\psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}, \tau') + \Psi_\alpha^*\Psi_{\alpha'}^*\delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau)\delta\psi_{\alpha'}(\mathbf{x}, \tau') \right\} + \dots \quad (9.32) \end{aligned}$$

Wir beobachten, daß die Replika-Wirkung (9.30) im Raum der Replika-Feldern $\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau)$, $\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau)$ eine globale $O(N)$ -Symmetrie aufweist. Weder durch die 2-Teilchen-Wechselwirkung noch durch die Unordnung wird eine bestimmte Richtung im Raum der Replika-Felder $\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau)$, $\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau)$ ausgezeichnet. Wir nehmen daher im folgenden an, daß die Background-Felder Ψ_α^* , Ψ_α nicht vom Replika-Index α abhängen:

$$\Psi_\alpha^* = \Psi^*, \quad \Psi_\alpha = \Psi. \quad (9.33)$$

Dadurch vereinfacht sich die Replika-Wirkung (9.32) zu

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^{(N)}[\Psi^* + \delta\psi^*, \Psi + \delta\psi] &= \hbar\beta V N \left[-\mu\Psi^*\Psi + \frac{1}{2}(g - R_0\beta N)\Psi^{*2}\Psi^2 \right] + \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \\ &\times \sum_{\alpha=1}^N \left\{ \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \left[\hbar\frac{\partial}{\partial\tau} - \frac{\hbar^2}{2M}\Delta - \mu + (2g - R_0\beta N)\Psi^*\Psi \right] \delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) + \frac{g}{2}\Psi^{*2}\delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau)^2 \right. \\ &+ \left. \frac{g}{2}\Psi^2\delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau)^2 \right\} - \frac{R_0}{2\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\alpha'=1}^N \left\{ \Psi^*\Psi \left[\delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau)\delta\psi_{\alpha'}(\mathbf{x}, \tau') \right. \right. \\ &+ \left. \left. \delta\psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}, \tau')\delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \right] + \Psi^2\delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau)\delta\psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}, \tau') + \Psi^{*2}\delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau)\delta\psi_{\alpha'}(\mathbf{x}, \tau') \right\} + \dots \quad (9.34) \end{aligned}$$

Eine weitere Vereinfachung wird dadurch möglich, daß die Replika-Wirkung (9.30) für jeden Replika-Index α eine kontinuierliche $U(1)$ -Symmetrie aufweist. Deshalb nehmen wir an, daß wir

für den Background Ψ^*, Ψ eine beliebige Phase wählen können und setzen

$$\Psi^* = \sqrt{n_0}, \quad \Psi = \sqrt{n_0} \quad (9.35)$$

mit der Kondensatdichte n_0 . Damit reduziert sich (9.34) weiter auf

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^{(N)}[\sqrt{n_0} + \delta\psi^*, \sqrt{n_0} + \delta\psi] &= \hbar\beta V N \left[-\mu n_0 + \frac{1}{2} (g - R_0\beta N) n_0^2 \right] + \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \\ &\times \sum_{\alpha=1}^N \left\{ \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta - \mu + (2g - R_0\beta N) n_0 \right] \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) + \frac{g}{2} n_0 \left[\delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau)^2 \right. \right. \\ &+ \left. \left. \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau)^2 \right] \right\} - \frac{R_0 n_0}{2\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\alpha'=1}^N \left\{ \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha'}(\mathbf{x}, \tau') \right. \\ &+ \left. \delta\psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}, \tau') \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) + \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}, \tau') + \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha'}(\mathbf{x}, \tau') \right\} + \dots \end{aligned} \quad (9.36)$$

Übertragen wir die Background-Methode von Abschnitt 6.5 auf das ungeordnete Bose-System, so ergibt sich das effektive Potential

$$V_{\text{eff}}^{(N)}(n_0) = -\frac{1}{\beta} \ln \langle \mathcal{Z}^N \rangle \quad (9.37)$$

für eine bestimmte Zahl N an Replikas aus

$$e^{-\beta V_{\text{eff}}^{(N)}(n_0)} = \left\{ \prod_{\alpha=1}^N \oint \mathcal{D}\delta\psi_{\alpha}^* \oint \mathcal{D}\delta\psi_{\alpha} \right\} e^{-\mathcal{A}^{(N)}[\sqrt{n_0} + \delta\psi^*, \sqrt{n_0} + \delta\psi]/\hbar}. \quad (9.38)$$

Führen wir den Replika-Limes $N \rightarrow 0$ im Sinne von (9.24) durch, so geht das effektive Potential (9.37) über in

$$V_{\text{eff}}(n_0) = \lim_{N \rightarrow 0} \frac{V_{\text{eff}}^{(N)}(n_0)}{N}. \quad (9.39)$$

Den führenden Beitrag zum effektiven Potential für N Replikas können wir aus (9.36) und (9.38) ablesen:

$$V_{\text{eff}}^{(0,N)}(n_0) = -\mu n_0 V N + \frac{g}{2} n_0^2 V N - \frac{R_0}{2} n_0^2 \beta V N^2. \quad (9.40)$$

Wir sehen, daß der Beitrag der Unordnung zum Baumgraphen-Resultat (9.40) proportional zu N^2 ist und daher im Replika-Limes $N \rightarrow 0$ von (9.39) verschwindet:

$$V_{\text{eff}}^{(0)}(n_0) = \lim_{N \rightarrow 0} \frac{V_{\text{eff}}^{(0,N)}(n_0)}{N} = -\mu n_0 V + \frac{g}{2} n_0^2 V. \quad (9.41)$$

Das bedeutet, daß die Unordnung nicht die Gross-Pitaevskii-Theorie verändert, sondern erst auf der Ebene der Bogoliubov-Theorie auftritt. Hierzu berechnen wir die nächste Ordnung in der Sattelpunktsnäherung zu (9.38)

$$e^{-\beta V_{\text{eff}}^{(1,N)}(n_0)} = \left\{ \prod_{\alpha=1}^N \oint \mathcal{D}\delta\psi_{\alpha}^* \oint \mathcal{D}\delta\psi_{\alpha} \right\} e^{-\mathcal{A}^{(2,N)}[\delta\psi^*, \delta\psi]/\hbar}, \quad (9.42)$$

wobei die Wirkung

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^{(2,N)}[\delta\psi^*, \delta\psi] &= \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x \int d^D x' \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\alpha'=1}^N \\ &\times \begin{pmatrix} \delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \\ \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \end{pmatrix}^\dagger G_{\alpha\alpha'}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') \begin{pmatrix} \delta\psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') \\ \delta\psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (9.43)$$

alle Beiträge von (9.36) beinhaltet, die in den Fluktuationen der Replika-Felder $\delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau)$, $\delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau)$ quadratisch sind. Der Integralkern $G_{\alpha\alpha'}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau')$ besitzt eine einfache Abhängigkeit von den Replika-Indizes $\alpha\alpha'$, die die folgende Zerlegung nahelegt:

$$G_{\alpha\alpha'}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = g_1^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') \delta_{\alpha\alpha'} + g_2^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau'). \quad (9.44)$$

Dabei stellt $g_1^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau')$ eine 2×2 -Matrix von Differentialoperatoren dar, die lokal in Raum und Imaginärzeit ist:

$$g_{1\psi^*\psi}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(\tau - \tau') \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau'} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta' - \mu + (2g - \beta R_0 N) n_0 \right], \quad (9.45)$$

$$g_{1\psi^*\psi}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(\tau - \tau') \left[-\hbar \frac{\partial}{\partial \tau'} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta' - \mu + (2g - \beta R_0 N) n_0 \right], \quad (9.46)$$

$$g_{1\psi\psi}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(\tau - \tau') g n_0, \quad (9.47)$$

$$g_{1\psi^*\psi^*}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(\tau - \tau') g n_0. \quad (9.48)$$

Demgegenüber ist $g_2^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau')$ eine 2×2 -Matrix, die zwar lokal im Raum aber konstant in der Imaginärzeit ist:

$$g_2^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = -\frac{R_0 n_0}{\hbar} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (9.49)$$

Wir führen wieder eine Fourier-Transformation und eine Matsubara-Zerlegung des Integralkernes $G_{\alpha\alpha'}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau')$ analog zu (6.89) durch:

$$G_{\alpha\alpha'}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_m(\tau-\tau')} G_{\alpha\alpha'}^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m). \quad (9.50)$$

Dabei zerfällt die Fourier-Matsubara-Transformierte $G_{\alpha\alpha'}^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m)$ entsprechend zu (9.44) in zwei Beiträge

$$G_{\alpha\alpha'}^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m) = g_1^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m) \delta_{\alpha\alpha'} + g_2^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m), \quad (9.51)$$

wobei die auftretenden 2×2 -Matrizen von folgender Form sind

$$g_1^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m) = \begin{pmatrix} a(\mathbf{k}, \omega_m) & b(\mathbf{k}, \omega_m) \\ b(\mathbf{k}, \omega_m) & a^*(\mathbf{k}, \omega_m) \end{pmatrix}, \quad (9.52)$$

$$g_2^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m) = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} c(\mathbf{k}, \omega_m). \quad (9.53)$$

Hierbei treten die Funktionen

$$a(\mathbf{k}, \omega_m) = -i\hbar\omega_m + \tilde{\epsilon}(\mathbf{k}), \quad a^*(\mathbf{k}, \omega_m) = i\hbar\omega_m + \tilde{\epsilon}(\mathbf{k}), \quad (9.54)$$

$$b(\mathbf{k}, \omega_m) = gn_0, \quad c(\mathbf{k}, \omega_m) = -\beta R_0 n_0 \delta_{m,0} \quad (9.55)$$

mit der Dispersion

$$\tilde{\epsilon}(\mathbf{k}) = \epsilon(\mathbf{k}) - \mu + (2g - \beta R_0 N) n_0 \quad (9.56)$$

und der freien Dispersion (6.80) auf. Die aus (9.42), (9.43) folgende erste Ordnung des effektiven Potentials mit N Replikas berechnet sich analog zu (6.99)

$$V_{\text{eff}}^{(1,N)}(n_0) = \frac{V}{2\beta} \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \ln \text{Det } G_{\alpha\alpha'}^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m). \quad (9.57)$$

Demnach müssen wir nun die Determinante der $2N \times 2N$ -Matrix (9.51) mit (9.52), (9.53) für eine beliebige Replikazahl N auswerten. Im Falle $N = 1$ tritt die Determinante

$$D_1 = \begin{vmatrix} a+c & b+c \\ b+c & a^*+c \end{vmatrix} = aa^* - b^2 + (a+a^* - 2b)c \quad (9.58)$$

auf, während für $N = 2$ gilt

$$D_2 = \begin{vmatrix} a+c & b+c & c & c \\ b+c & a^*+c & c & c \\ c & c & a+c & b+c \\ c & c & b+c & a^*+c \end{vmatrix} = (aa^* - b^2)^2 + 2(aa^* - b^2)(a+a^* - 2b)c. \quad (9.59)$$

Wir überlassen es dem Leser, die Determinante für eine beliebige Zahl N von Replikas zu berechnen und geben nur das Ergebnis an:

$$D_N = (aa^* - b^2)^N + N(aa^* - b^2)^{N-1}(a+a^* - 2b)c. \quad (9.60)$$

Aus (9.54), (9.55) und (9.60) folgt damit für die erste Ordnung des effektiven Potentials (9.57):

$$V_{\text{eff}}^{(1,N)}(n_0) = \frac{V}{2\beta} \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \ln \left\{ \left[\hbar^2 \omega_m^2 + \tilde{\epsilon}(\mathbf{k})^2 - g^2 n_0^2 \right]^N - 2\beta R n_0 N \left[\tilde{\epsilon}(\mathbf{k})^2 - g^2 n_0^2 \right]^{N-1} [\tilde{\epsilon}(\mathbf{k}) - gn_0] \delta_{m,0} \right\}. \quad (9.61)$$

Aufgrund des Kronecker-Symbols $\delta_{m,0}$ spalten wir die Matsubara-Reihe in die Beiträge $m \neq 0$ und $m = 0$ auf und erhalten dadurch

$$V_{\text{eff}}^{(1,N)}(n_0) = \frac{V}{2\beta} \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left\{ N \sum_{m=-\infty}^{\infty} \ln \left[\hbar^2 \omega_m^2 + \tilde{\epsilon}(\mathbf{k})^2 - g^2 n_0^2 \right] + \ln \frac{\tilde{\epsilon}(\mathbf{k})^2 - g^2 n_0^2 - 2\beta R n_0 N [\tilde{\epsilon}(\mathbf{k}) - gn_0]}{\tilde{\epsilon}(\mathbf{k})^2 - g^2 n_0^2} \right\}. \quad (9.62)$$

Die verbleibende Matsubara-Reihe entspricht der der freien Energie eines harmonischen Oszillators mit der Frequenz $\sqrt{\tilde{\epsilon}(\mathbf{k})^2 - g^2 n_0^2}/\hbar$:

$$V_{\text{eff}}^{(1,N)}(n_0) = V \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left\{ \frac{N}{\beta} \ln \left[2 \sinh \frac{\beta \sqrt{\tilde{\epsilon}(\mathbf{k})^2 - g^2 n_0^2}}{2} \right] + \frac{1}{2\beta} \ln \frac{\tilde{\epsilon}(\mathbf{k})^2 - g^2 n_0^2 - 2\beta R n_0 N [\tilde{\epsilon}(\mathbf{k}) - g n_0]}{\tilde{\epsilon}(\mathbf{k})^2 - g^2 n_0^2} \right\}. \quad (9.63)$$

Nun haben wir noch den Replika-Limes $N \rightarrow 0$ von (9.39) durchzuführen:

$$V_{\text{eff}}^{(1)}(n_0) = \lim_{N \rightarrow 0} \frac{V_{\text{eff}}^{(1,N)}(n_0)}{N}. \quad (9.64)$$

Unter Berücksichtigung der Dispersion (9.56) geht dabei (9.63) über in

$$V_{\text{eff}}^{(1,N)}(n_0) = V \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left\{ \frac{1}{\beta} \ln \left[2 \sinh \frac{\beta E(\mathbf{k})}{2} \right] - \frac{\epsilon(\mathbf{k}) - \mu + g n_0}{E(\mathbf{k})^2} R_0 n_0 \right\} \quad (9.65)$$

mit der Bogoliubov-Dispersion (6.110). Wir beobachten in (9.65), daß die Unordnung zu einem temperaturunabhängigen Beitrag zum effektiven Potential führt. Fassen wir (9.41) und (9.65) zusammen, so ergibt sich das effektive Potential zu

$$V_{\text{eff}}(n_0) = -\mu n_0 V + \frac{g}{2} n_0^2 V + \eta V \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left\{ \frac{E(\mathbf{k})}{2} + \frac{1}{\beta} \ln \left[1 - e^{-\beta E(\mathbf{k})} \right] - \frac{\epsilon(\mathbf{k}) - \mu + g n_0}{E(\mathbf{k})^2} R_0 n_0 \right\} + \mathcal{O}(\eta^2), \quad (9.66)$$

wobei wir für die weitere Diskussion wieder den Kleinheitsparameter η eingeführt haben.

9.4 Kondensatdichte

Die Extremalisierung des effektiven Potentials (9.66) bezüglich des Backgroundes führt für nicht verschwindende Ψ^*, Ψ auf die Bedingung (6.111). Durch Einsetzen von (9.66) in (6.111) läßt sich die Kondensatdichte n_0 analog zu (6.115) berechnen:

$$n_0 = \frac{\mu}{g} + \eta \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left\{ -\frac{2\epsilon(\mathbf{k}) + \mu}{E(\mathbf{k})} \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta E(\mathbf{k})} - 1} \right] + \frac{[\epsilon(\mathbf{k}) - \mu] R_0}{[\epsilon(\mathbf{k}) + 2\mu]^2 g} \right\} + \mathcal{O}(\eta^2), \quad (9.67)$$

wobei die Dispersion $E(\mathbf{k})$ durch (6.116) gegeben ist. Werten wir das effektive Potential (9.66) am Extremum (9.67) aus, so erhalten wir analog zu (6.117) die großkanonische freie Energie

$$\mathcal{F} = -\frac{\mu^2}{2g} V + \eta V \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left\{ \frac{E(\mathbf{k})}{2} + \frac{1}{\beta} \ln \left[1 - e^{-\beta E(\mathbf{k})} \right] - \frac{\mu R_0}{g [\epsilon(\mathbf{k}) + 2\mu]} \right\} + \mathcal{O}(\eta^2). \quad (9.68)$$

Eine Differentiation nach dem chemischen Potential führt wie in (6.119) auf die Teilchendichte:

$$n = \frac{\mu}{g} + \eta \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left\{ -\frac{\epsilon(\mathbf{k})}{E(\mathbf{k})} \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta E(\mathbf{k})} - 1} \right] + \frac{\epsilon(\mathbf{k}) R_0}{g [\epsilon(\mathbf{k}) + 2\mu]^2} \right\} + \mathcal{O}(\eta^2). \quad (9.69)$$

Eine Elimination des chemischen Potentials μ aus (9.67) und (9.69) ergibt analog zu (6.120)

$$n = n_0 + \eta \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left\{ \frac{\epsilon(\mathbf{k}) + gn_0}{E(\mathbf{k})} \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta E(\mathbf{k})} - 1} \right] + \frac{n_0 R_0}{[\epsilon(\mathbf{k}) + 2gn_0]^2} \right\} + \mathcal{O}(\eta^2) \quad (9.70)$$

mit der Dispersion (6.121). Für kleine η läßt sich dieser Zusammenhang zwischen Teilchendichte n und Kondensatdichte n_0 analog zu (6.122) verbessern:

$$n = n_0 + \eta \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left\{ \frac{\epsilon(\mathbf{k}) + gn}{E(\mathbf{k})} \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta E(\mathbf{k})} - 1} \right] + \frac{n R_0}{[\epsilon(\mathbf{k}) + 2gn]^2} \right\} + \mathcal{O}(\eta^2). \quad (9.71)$$

Dabei stellt $E(\mathbf{k})$ die Bogoliubov-Dispersion (6.123) dar, die nicht von der Unordnung abhängt. Wir lesen aber aus (9.71) ab, daß es am absoluten Temperaturnullpunkt $T = 0$ zu einer Entleerung der Kondensatdichte kommt, die auf die Unordnung zurückzuführen ist:

$$\Delta n_0 = -n R_0 \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{1}{[\epsilon(\mathbf{k}) + 2gn]^2}. \quad (9.72)$$

Die Integrationsformel (6.135) führt (9.72) über in

$$\Delta n_0 = -\frac{n R_0}{\Gamma(D/2)} \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2} \right)^{D/2} \int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon^{D/2-1}}{(\epsilon + 2gn)^2}. \quad (9.73)$$

Das verbleibende ϵ -Integral läßt sich mit Hilfe von (6.137), (6.138) auswerten:

$$\Delta n_0 = -\frac{\Gamma(2 - D/2)n R_0}{(2gn)^{2-D/2}} \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2} \right)^{D/2}. \quad (9.74)$$

In $D = 3$ Dimensionen lautet diese Unordnungsentleerung

$$\Delta n_0 = -\frac{M^2}{8\pi^{3/2}\hbar^4} \sqrt{\frac{n}{a}} R_0, \quad (9.75)$$

d.h. sie divergiert im Limes einer verschwindenden 2-Teilchen-Wechselwirkung [46,47]. Dieses Ergebnis besagt, daß ein nichtwechselwirkendes aber ungeordnetes Bose-Gas physikalisch nicht stabil ist. Das kann man sich qualitativ dadurch erklären, daß wir die Unordnung durch ein Zufallspotential $V(\mathbf{x})$ beschreiben, das gemäß (9.2), (9.4) beliebig große bzw. kleine Werte annehmen kann. Es gibt daher auch Potentialkonfigurationen mit beliebig tiefen Minima, in denen das nichtwechselwirkende Bose-Gas kondensieren kann und so zu einer beliebig großen Energieabsenkung führt. Diese physikalische Instabilität des ungeordneten nichtwechselwirkenden Bose-Gases ist insofern bemerkenswert, als ein ungeordnetes nichtwechselwirkendes Fermi-Gas stabil ist. Dort tritt beispielsweise das Phänomen der Anderson-Lokalisierung auf [48]. Wir bemerken, daß man die Unordnungsentleerung (9.75) am absoluten Temperaturnullpunkt $T = 0$ auch für den Fall berechnen kann, daß das Zufallspotential eine Gaußsche Korrelation (9.2), (9.3) mit einer nichtverschwindenden Kohärenzlänge ξ besitzt [45]. Außerdem weisen wir darauf hin, daß die Unordnung im Rahmen der Bogoliubov-Theorie keinen Einfluß auf die Temperaturabhängigkeit der Kondensatdichte (9.71) hat.

9.5 Innere Energie

Aus der großkanonischen freien Energie (9.68) des ungeordneten Bose-Gases erhalten wir gemäß (1.35) die Entropie

$$S = \eta V \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left\{ -k_B \ln \left[1 - e^{-\beta E(\mathbf{k})} \right] + \frac{k_B \beta E(\mathbf{k})}{e^{\beta E(\mathbf{k})} - 1} \right\}, \quad (9.76)$$

die nicht von der Unordnung abhängt. Die innere Energie lautet dann nach (1.30) zunächst

$$U = \frac{\mu^2}{2g} V + \eta V \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left\{ \frac{E(\mathbf{k})}{2} + \frac{E(\mathbf{k})}{e^{\beta E(\mathbf{k})} - 1} - \frac{\mu \epsilon(\mathbf{k})}{E(\mathbf{k})} \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta E(\mathbf{k})} - 1} \right] - \frac{\mu R_0}{g [\epsilon(\mathbf{k}) + 2\mu]} + \frac{\mu \epsilon(\mathbf{k}) R_0}{g [\epsilon(\mathbf{k}) + 2\mu]^2} \right\}. \quad (9.77)$$

Eliminiert man das chemische Potential μ mit Hilfe von (9.69), so reduziert sich (9.77) bis zur ersten Ordnung im Kleinheitsparameter η auf

$$U = \frac{1}{2} g n^2 V + \eta V \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left\{ \frac{E(\mathbf{k})}{2} + \frac{E(\mathbf{k})}{e^{\beta E(\mathbf{k})} - 1} - \frac{n R_0}{\epsilon(\mathbf{k}) + 2gn} \right\}, \quad (9.78)$$

wobei $E(\mathbf{k})$ die Bogoliubov-Dispersion (6.123) bezeichnet. Am absoluten Temperaturnullpunkt $T = 0$ geht die innere Energie (9.78) in die Grundzustandsenergie über:

$$E_0 = \lim_{T \rightarrow 0} U = \frac{1}{2} g n^2 V + V \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left\{ \frac{E(\mathbf{k})}{2} - \frac{n R_0}{\epsilon(\mathbf{k}) + 2gn} \right\}. \quad (9.79)$$

Mit Hilfe von (6.123) und (6.135) erhalten wir aus (9.79)

$$E_0 = \frac{1}{2} g n^2 V + \frac{V}{\Gamma(D/2)} \left(\frac{M}{2\pi \hbar^2} \right)^{D/2} \int_0^\infty d\epsilon \epsilon^{D/2-1} \left\{ \frac{\sqrt{\epsilon^2 + 2gn\epsilon}}{2} - \frac{n R_0}{\epsilon + 2gn} \right\}, \quad (9.80)$$

so daß beide ϵ -Integrale durch (6.137), (6.138) berechenbar sind:

$$E_0 = \frac{1}{2} g n^2 V - V \left(\frac{M}{2\pi \hbar^2} \right)^{D/2} \left\{ \frac{\Gamma((D+1)/2) \Gamma(-D/2-1)}{4\sqrt{\pi} \Gamma(D/2)} (2gn)^{D/2+1} + \Gamma(1-D/2) (2gn)^{D/2-1} n R_0 \right\}. \quad (9.81)$$

In $D = 3$ Dimensionen lautet die Grundzustandsenergie

$$E_0 = \frac{2\pi \hbar^2 a n^2 V}{M} \left\{ 1 + \frac{128}{15} \sqrt{\frac{a^3 n}{\pi}} \right\} + \frac{2M \sqrt{n^3 a}}{\sqrt{\pi} \hbar^2} R_0. \quad (9.82)$$

Wir bemerken, daß für eine verschwindende Unordnung noch weitere Beiträge zur Grundzustandsenergie des schwach wechselwirkenden Bose-Gases berechnet wurden [49]. Der temperaturabhängige Beitrag zur inneren Energie (9.78) ist unabhängig von der Unordnung:

$$\Delta U(T) = V \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{E(\mathbf{k})}{e^{\beta E(\mathbf{k})} - 1}. \quad (9.83)$$

Mit Hilfe der Integrationsformel (6.135) und (6.123) geht (9.83) über in

$$\Delta U(T) = \frac{V}{\Gamma(D/2)} \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2} \right)^{D/2} \int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon^{(D-1)/2} \sqrt{\epsilon + 2\mu}}{e^{\beta\sqrt{\epsilon^2 + 2\mu\epsilon}} - 1}. \quad (9.84)$$

Durch die Substitution $x(\epsilon) = \sqrt{2\beta^2\mu\epsilon}$ erhalten wir dann

$$\Delta U(T) = \frac{V}{\Gamma(D/2)2^{D/2-1}\beta^{D+1}\mu^{D/2}} \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2} \right)^{D/2} \int_0^\infty dx \frac{x^D \sqrt{1 + x^2/4\beta^2\mu^2}}{e^{\sqrt{x^2 + x^4/4\beta^2\mu^2}} - 1}, \quad (9.85)$$

woraus wir den führenden Beitrag im Limes $\beta \rightarrow \infty$ ablesen können:

$$\Delta U(T) = \frac{V}{\Gamma(D/2)2^{D/2-1}\beta^{D+1}\mu^{D/2}} \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2} \right)^{D/2} \int_0^\infty dx \frac{x^D}{e^x - 1} + \dots \quad (9.86)$$

Damit erhalten wir für die Temperaturabhängigkeit der inneren Energie

$$\Delta U(T) = \frac{\Gamma(D+1)\zeta(D+1)V(k_B T)^{D+1}}{\Gamma(D/2)2^{D-1}\pi^{D/2}\hbar^D c^D} + \dots, \quad (9.87)$$

so daß für die Wärmekapazität gilt

$$C = \frac{\Gamma(D+2)\zeta(D+1)(k_B T)^D k_B V}{\Gamma(D/2)2^{D-1}\pi^{D/2}\hbar^D c^D} + \dots, \quad (9.88)$$

In $D = 3$ Dimensionen erhalten wir

$$C = \frac{2\pi^2(k_B T)^3 k_B V}{15\hbar^3 c^3} + \dots \quad (9.89)$$

Demnach besitzt ein wechselwirkendes Bose-Gas am absoluten Temperaturnullpunkt $T = 0$ mit $C \sim T^3$ eine andere Temperaturabhängigkeit als das nichtwechselwirkende Bose-Gas mit $C \sim T^{3/2}$ in (4.225).

9.6 Superfluide Dichte

Zum Schluß berechnen wir die superfluide Dichte des ungeordneten Bose-Gases. Hierzu müssen wir nach Kapitel 8 die Situation betrachten, daß sich das ungeordnete Bose-Gas in einem mit der Geschwindigkeit \mathbf{u} gleichförmig bewegten Inertialsystem befindet und daß sich dabei das Kondensat mit der Geschwindigkeit \mathbf{v} bewegt. Wie können wir nun die beiden Geschwindigkeiten \mathbf{u} und \mathbf{v} in unseren thermodynamischen Überlegungen einführen, ohne die gesamte Rechnung von Kapitel 8 im Rahmen des Replika-Formalismus im einzelnen durchführen zu müssen? Sehen wir uns dahingehend nochmals Kapitel 8 an, so erkennen wir, daß die Einführung der Geschwindigkeiten \mathbf{u} und \mathbf{v} letztendlich auf zwei grundlegende Substitutionen zurückgeht. Zum einen ist das chemische Potential μ durch das effektive Potential μ_{eff} von (8.13) zu ersetzen:

$$\mu \quad \Longrightarrow \quad \mu_{\text{eff}} = \mu + M\mathbf{u}\mathbf{v} - \frac{M}{2}\mathbf{v}^2. \quad (9.90)$$

Zum anderen lesen wir aus (8.31) ab, daß die Diagonalelemente der Fourier-Matsubara-Transformierten durch einen Term linear in \mathbf{u} , \mathbf{v} zu modifizieren sind:

$$\tilde{\epsilon}(\mathbf{k}) \implies \tilde{\epsilon}(\mathbf{k}) \pm \hbar \mathbf{k}(\mathbf{u} - \mathbf{v}). \quad (9.91)$$

Für die Fourier-Matsubara-Transformierte (9.51)–(9.53) des ungeordneten Bose-Gases hat das die Konsequenz, daß die Funktionen $a(\mathbf{k}, \omega_m)$, $a^*(\mathbf{k}, \omega_m)$ in (9.54) zu ersetzen sind durch

$$a(\mathbf{k}, \omega_m) \implies a_1(\mathbf{k}, \omega_m) = -i\hbar\omega_m + \tilde{\epsilon}(\mathbf{k}) + \hbar \mathbf{k}(\mathbf{u} - \mathbf{v}), \quad (9.92)$$

$$a^*(\mathbf{k}, \omega_m) \implies a_2(\mathbf{k}, \omega_m) = i\hbar\omega_m + \tilde{\epsilon}(\mathbf{k}) - \hbar \mathbf{k}(\mathbf{u} - \mathbf{v}), \quad (9.93)$$

mit der Dispersion

$$\tilde{\epsilon}(\mathbf{k}) = \epsilon(\mathbf{k}) - \mu_{\text{eff}} + (2g - \beta R_0 N)n_0. \quad (9.94)$$

Die Funktionen $b(\mathbf{k}, \omega_m)$ und $c(\mathbf{k}, \omega_m)$ werden dagegen nicht von diesen Substitutionen verändert und sind weiterhin durch (9.55) gegeben. Übertragen wir diese Substitutionen auf die Determinante (9.60), so erhalten wir nun

$$D_N \implies D_N = (a_1 a_2 - b^2)^N + N(a_1 a_2 - b^2)^{N-1}(a_1 + a_2 - 2b)c. \quad (9.95)$$

Die erste Ordnung des effektiven Potentials (9.57) für N Replika lautet dann unter Beachtung von (9.55), (9.92) und (9.93):

$$V_{\text{eff}}^{(1,N)}(n_0) = \frac{V}{2\beta} \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \ln \left\{ \left[\hbar^2 \omega_m^2 + 2i\hbar \mathbf{k}(\mathbf{u} - \mathbf{v})\hbar\omega_m + \tilde{\epsilon}(\mathbf{k})^2 - g^2 n_0^2 - [\hbar \mathbf{k}(\mathbf{u} - \mathbf{v})]^2 \right]^N - 2\beta R n_0 N \left[\tilde{\epsilon}(\mathbf{k})^2 - g^2 n_0^2 - [\hbar \mathbf{k}(\mathbf{u} - \mathbf{v})]^2 \right]^{N-1} [\tilde{\epsilon}(\mathbf{k}) - g n_0] \delta_{m,0} \right\}. \quad (9.96)$$

Auch hier spalten wir aufgrund des Kronecker-Symbols $\delta_{m,0}$ die Matsubara-Reihe in die Beiträge $m \neq 0$ und $m = 0$ auf und erhalten

$$V_{\text{eff}}^{(1,N)}(n_0) = \frac{V}{2\beta} \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left\{ N \sum_{m=-\infty}^{\infty} \ln \left[\hbar^2 \omega_m^2 + 2i\hbar \mathbf{k}(\mathbf{u} - \mathbf{v})\hbar\omega_m + \tilde{\epsilon}(\mathbf{k})^2 - g^2 n_0^2 - [\hbar \mathbf{k}(\mathbf{u} - \mathbf{v})]^2 \right] + \ln \frac{\tilde{\epsilon}(\mathbf{k})^2 - g^2 n_0^2 - [\hbar \mathbf{k}(\mathbf{u} - \mathbf{v})]^2 - 2\beta R_0 n_0 N [\tilde{\epsilon}(\mathbf{k}) - g n_0]}{\tilde{\epsilon}(\mathbf{k})^2 - g^2 n_0^2 - [\hbar \mathbf{k}(\mathbf{u} - \mathbf{v})]^2} \right\}. \quad (9.97)$$

Die verbleibenden Matsubara-Reihe ist von der Form (8.34) mit den Parametern

$$a = \mathbf{k}(\mathbf{u} - \mathbf{v}), \quad b = \frac{\tilde{\epsilon}(\mathbf{k})^2 - g^2 n_0^2}{\hbar^2} - [\mathbf{k}(\mathbf{u} - \mathbf{v})]^2 \quad (9.98)$$

und läßt sich deshalb mit Hilfe von (8.38) berechnen:

$$V_{\text{eff}}^{(1)}(\Psi^*, \Psi) = V \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left\{ \frac{N}{2\beta} \ln \left[1 - e^{-\beta[E(\mathbf{k}) + \hbar \mathbf{k}(\mathbf{u} - \mathbf{v})]} \right] + \frac{N}{2\beta} \ln \left[1 - e^{-\beta[E(\mathbf{k}) - \hbar \mathbf{k}(\mathbf{u} - \mathbf{v})]} \right] + \frac{NE(\mathbf{k})}{2} + \frac{1}{2\beta} \ln \frac{\tilde{\epsilon}(\mathbf{k})^2 - g^2 n_0^2 - [\hbar \mathbf{k}(\mathbf{u} - \mathbf{v})]^2 - 2\beta R_0 n_0 N [\tilde{\epsilon}(\mathbf{k}) - g n_0]}{\tilde{\epsilon}(\mathbf{k})^2 - g^2 n_0^2 - [\hbar \mathbf{k}(\mathbf{u} - \mathbf{v})]^2} \right\}. \quad (9.99)$$

Hierbei bezeichnet $E(\mathbf{k})$ die Bogoliubov-Dispersion

$$E(\mathbf{k}) = \sqrt{[\epsilon(\mathbf{k})^2 - \mu_{\text{eff}} + gn_{\mathbf{0}}]^2 + 2[\epsilon(\mathbf{k})^2 - \mu_{\text{eff}} + gn_{\mathbf{0}}]gn_{\mathbf{0}}}. \quad (9.100)$$

Aufgrund der Symmetrie $E(-\mathbf{k}) = E(\mathbf{k})$ reduziert sich (9.99) auf

$$V_{\text{eff}}^{(1)}(\Psi^*, \Psi) = V \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left\{ \frac{NE(\mathbf{k})}{2} + \frac{N}{\beta} \ln \left[1 - e^{-\beta[E(\mathbf{k}) + \hbar\mathbf{k}(\mathbf{u}-\mathbf{v})]} \right] \right. \\ \left. + \frac{1}{2\beta} \ln \frac{\tilde{\epsilon}(\mathbf{k})^2 - g^2 n_{\mathbf{0}}^2 - [\hbar\mathbf{k}(\mathbf{u}-\mathbf{v})]^2 - 2\beta R_0 n_{\mathbf{0}} N [\tilde{\epsilon}(\mathbf{k}) - gn_{\mathbf{0}}]}{\tilde{\epsilon}(\mathbf{k})^2 - g^2 n_{\mathbf{0}}^2 - [\hbar\mathbf{k}(\mathbf{u}-\mathbf{v})]^2} \right\}. \quad (9.101)$$

Im Replika-Limes $N \rightarrow 0$ von (9.64) lautet die erste Ordnung des effektiven Potentials

$$V_{\text{eff}}^{(1)}(n_{\mathbf{0}}) = V \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left\{ \frac{E(\mathbf{k})}{2} + \frac{1}{\beta} \ln \left[1 - e^{-\beta[E(\mathbf{k}) + \hbar\mathbf{k}(\mathbf{u}-\mathbf{v})]} \right] - \frac{[\epsilon(\mathbf{k}) - \mu_{\text{eff}} + gn_{\mathbf{0}}]R_0 n_{\mathbf{0}}}{E(\mathbf{k})^2 - [\hbar\mathbf{k}(\mathbf{u}-\mathbf{v})]^2} \right\}. \quad (9.102)$$

Für kleine Geschwindigkeiten \mathbf{u}, \mathbf{v} können wir (9.102) bis zur zweiten Ordnung Taylor entwickeln.

$$V_{\text{eff}}^{(1)}(n_{\mathbf{0}}) = V \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left\{ \frac{E(\mathbf{k})}{2} + \frac{1}{\beta} \ln \left[1 - e^{-\beta E(\mathbf{k})} \right] - \frac{\hbar\mathbf{k}(\mathbf{u}-\mathbf{v})}{e^{\beta E(\mathbf{k})} - 1} - \frac{\beta [\hbar\mathbf{k}(\mathbf{u}-\mathbf{v})]^2 e^{\beta E(\mathbf{k})}}{2 [e^{\beta E(\mathbf{k})} - 1]^2} \right. \\ \left. - R_0 n_{\mathbf{0}} \frac{\epsilon(\mathbf{k}) - \mu_{\text{eff}} + gn_{\mathbf{0}}}{E(\mathbf{k})^2} - R_0 n_{\mathbf{0}} \frac{\epsilon(\mathbf{k}) - \mu_{\text{eff}} + gn_{\mathbf{0}}}{E(\mathbf{k})^4} [\hbar\mathbf{k}(\mathbf{u}-\mathbf{v})]^2 + \dots \right\}. \quad (9.103)$$

Aufgrund der Symmetrie $E(-\mathbf{k}) = E(\mathbf{k})$ der Bogoliubov-Dispersion (9.100) vereinfacht sich (9.103) unter Beachtung von (8.45). Zusammen mit dem Baumgraphen-Resultat (9.41), (9.90) erhalten wir dann für das effektive Potential

$$V_{\text{eff}}(n_{\mathbf{0}}) = -\mu_{\text{eff}} n_{\mathbf{0}} V + \frac{g}{2} n_{\mathbf{0}}^2 V + \eta V \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left\{ \frac{E(\mathbf{k})}{2} + \frac{1}{\beta} \ln \left[1 - e^{-\beta E(\mathbf{k})} \right] - R_0 n_{\mathbf{0}} \frac{\epsilon(\mathbf{k}) - \mu_{\text{eff}} + gn_{\mathbf{0}}}{E(\mathbf{k})^2} \right. \\ \left. - \left[\frac{\beta \hbar^2 \mathbf{k}^2 e^{\beta E(\mathbf{k})}}{2D [e^{\beta E(\mathbf{k})} - 1]^2} + \frac{R_0 n_{\mathbf{0}} \hbar^2 \mathbf{k}^2 [\epsilon(\mathbf{k}) - \mu_{\text{eff}} + gn_{\mathbf{0}}]}{DE(\mathbf{k})^4} \right] (\mathbf{u}-\mathbf{v})^2 + \dots \right\}. \quad (9.104)$$

Hieraus berechnen wir analog zu Abschnitt 8.4 die normalfluide Dichte n_n und die superfluide Dichte n_s des ungeordneten Bose-Gases. Durch Differentiation von (9.104) nach der Geschwindigkeit \mathbf{u} erhalten wir dabei für den Systemimpuls (8.19)

$$\mathbf{p} = MVn\mathbf{v} + V \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left\{ \frac{\hbar^2 \beta \mathbf{k}^2 e^{\beta E(\mathbf{k})}}{D [e^{\beta E(\mathbf{k})} - 1]^2} + \frac{2\hbar^2 R_0 n_{\mathbf{0}} \mathbf{k}^2 \epsilon(\mathbf{k})}{DE(\mathbf{k})^4} \right\} (\mathbf{u}-\mathbf{v}) + \dots \quad (9.105)$$

mit der Dispersion (8.49). Demnach ist (9.105) von der Form (8.20), wobei die superfluide Dichte n_s und die normalfluide Dichte

$$n_n = \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left\{ \frac{\hbar^2 \beta \mathbf{k}^2 e^{\beta E(\mathbf{k})}}{DM [e^{\beta E(\mathbf{k})} - 1]^2} + \frac{4R_0 n}{D [\epsilon(\mathbf{k}) + 2gn]^2} \right\} \quad (9.106)$$

zusammen gerade die Gesamtdichte (8.21) ergeben. Wir lesen aus (8.21) und (9.106) ab, daß die superfluide Dichte am absoluten Temperaturnullpunkt $T = 0$ durch die Unordnung entleert wird durch um

$$\Delta n_s = -\frac{4R_0 n}{D} \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{1}{[\epsilon(\mathbf{k}) + 2gn]^2}. \quad (9.107)$$

Der Vergleich von (9.72) mit (9.107) zeigt, daß die durch Unordnung hervorgerufene Entleerung von Kondensatdichte und superfluider Dichte zueinander in Beziehung stehen:

$$\Delta n_s = \frac{4}{D} \Delta n_0. \quad (9.108)$$

Dies bedeutet in $D = 3$ Dimensionen, daß die Entleerung der superfluiden Dichte die Entleerung der Kondensatdichte um den Faktor $4/3$ übertrifft. Aus theoretischer Sicht wäre es daher am absoluten Temperaturnullpunkt $T = 0$ möglich, daß die superfluide Dichte verschwindet, während die Kondensatdichte von Null verschieden ist. Dieses Phänomen läßt sich dadurch erklären, daß zwar lokale Kondensate entstehen können, die aber durch die Unordnung bedingt nicht zur superfluiden Dichte beitragen [46].

Literaturverzeichnis

- [1] R.P. Feynman, *Statistical Mechanics* (Reading, Massachusetts, 1972).
- [2] H. Kleinert, *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics, and Financial Markets*, Third Edition (World Scientific, Singapore, 2004); Internet: http://www.physik.fu-berlin.de/~kleinert/kleiner_reb3/3rded.html.
- [3] H. Kleinert and V. Schulte-Frohlinde, *Critical Properties of ϕ^4 -Theories* (World Scientific, Singapore, 2001).
- [4] H. Kleinert, *Particles and Fields*, unpublished lecture notes, Free University of Berlin; Internet: <http://www.physik.fu-berlin.de/~kleinert/lecture-notes.html>
- [5] C.J. Pethick and H. Smith, *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases* (Cambridge University Press, Cambridge, 2002).
- [6] L. Pitaevskii and S. Stringari, *Bose-Einstein Condensation* (Clarendon Press, Oxford, 2003).
- [7] Ph.W. Courteille, V.S. Bagnato, and V.I. Yukalov, *Bose-Einstein Condensation of Trapped Atomic Gases*, Laser Phys. **11**, 659 (2001).
- [8] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, and S. Stringari, *Theory of Bose-Einstein Condensation in Trapped Gases*, Rev. Mod. Phys. **71**, 463 (1999).
- [9] A. Khare, *Fractional Statistics and Quantum Theory* (World Scientific, Singapore, 1997).
- [10] H.E. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena* (Oxford Science Publications, Oxford, 1971).
- [11] W. Greiner und J. Reinhardt, *Feldquantisierung*, Buchreihe Theoretische Physik, Band 7A (Verlag Harri Deutsch, Frankfurt, 1993).
- [12] J.E. Robinson, *Note on the Bose-Einstein Integral Functions*, Phys. Rev. **83**, 678 (1951).
- [13] I.S. Gradshteyn and I.M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series, and Products*, Corrected and Enlarged Edition (Academic Press, New York, 1980).
- [14] E.C. Titmarsh, *The Theory of the Riemann Zeta-Function* (Oxford Science Publications, Oxford, 1986).

- [15] L.D. Landau and E.M. Lifshitz, *Statistische Physik*, Teil 1 (Akademie-Verlag, Berlin, 1987).
- [16] W.I. Smirnov, *Lehrgang der Höheren Mathematik*, Band III.2 (VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1963)
- [17] G. Adam und O. Hittmair, *Wärmethorie*, 3. Auflage (Vieweg, Braunschweig, 1988).
- [18] J.R. Ensher, D.S. Jin, M.R. Matthews, C.E. Wieman, and E.A. Cornell, *Bose-Einstein Condensation in a Dilute Gas: Measurement of Energy and Ground-State Occupation*, Phys. Rev. Lett. **77**, 4984 (1996).
- [19] D. Wright, *Ground-State Energy of the Charged Bose Gas*, Phys. Rev. **143**, 91 (1966).
- [20] S.-K. Ma and C.-W. Woo, *Theory of a Charged Bose Gas. I*, Phys. Rev. **159**, 165 (1967).
- [21] C.-W. Woo and S.-K. Ma, *Theory of a Charged Bose Gas. II*, Phys. Rev. **159**, 176 (1967).
- [22] M. Schick and T. M. Wu, *Charged Bose Gas*, Phys. Rev. **177**, 313 (1969).
- [23] K. Góral, K. Rzazewski, and T. Pfau, *Bose-Einstein Condensation with Magnetic Dipole-Dipole Forces*, Phys. Rev. **A 61**, 051601(R) (2000).
- [24] S. Giovanazzi, A. Görlitz, and T. Pfau, *Tuning the Dipolar Interaction in Quantum Gases*, Phys. Rev. Lett. **89**, 130401 (2002).
- [25] K. Huang and C.N. Yang, *Quantum-Mechanical Many-Body Problem with Hard-Sphere Interaction*, Phys. Rev. **105**, 767 (1957).
- [26] K. Huang, *Statistical Mechanics*, Second Edition (John Wiley & Sons, New York, 1987).
- [27] T. Mayer-Kuckuk, *Kernphysik*, (Teubner, Stuttgart, 1984).
- [28] F. Schwabl, *Quantenmechanik I*, 5. Auflage (Springer, New York, 1998).
- [29] B. De Witt, *Dynamical Theory of Groups and Fields* (Gordon and Breach, New York, 1965).
- [30] R. Jackiw: *Functional Evaluation of the Effective Potential*, Phys. Rev. **D 9**, 1686 (1974).
- [31] N.N. Bogoliubov, *Izv. Akad. Nauk SSSR, Ser. Fiz.* **11**, 77 (1947); *Sov. Phys.-JETP* **7**, 41 (1958).
- [32] A.A. Abrikosov, L.P. Gorkov, I.E. Dzyaloshinski, *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics* (Prentice-Hall, New Jersey, 1963).
- [33] J.O. Andersen, *Theory of the Weakly Interacting Bose Gas*, eprint: cond-mat/0305138, Rev. Mod. Phys. (accepted for publication).
- [34] H. Shi and A. Griffin, *Finite-Temperature Excitations in a Dilute Bose-Condensed Gas*, Phys. Rep. **304**, 1 (1998).

- [35] J.M. Vogels, K. Xu, C. Raman, J.R. Abo-Shaeer, and W. Ketterle, *Experimental Observation of the Bogoliubov Transformation for a Bose-Einstein Condensed Gas*, Phys. Rev. Lett **88**, 060402 (2002).
- [36] I. Bloch: *Quantum Gases in Optical Lattices*, Physics World **17**, 25 (2004).
- [37] H. Kleinert, A. Pelster, and S. Schmidt, *Reentrant Phenomenon in Quantum Phase Diagram of Optical Boson Lattice*; eprint: cond-mat/0307412.
- [38] E. Timmermans, P. Tommasini, and K. Huang, *Variational Thomas-Fermi Theory of a Nonuniform Bose Condensate at Zero Temperature*, Phys. Rev. **A 55**, 3645 (1997).
- [39] F. Dalfovo, S. Giorgini, M. Guilleumas, L. Pitaevskii, and S. Stringari, *Collective and Single-Particle Excitations of a Trapped Bose Gas*, Phys. Rev. **A 56**, 3840 (1997).
- [40] W. Greiner, *Quantenmechanik I*, Buchreihe Theoretische Physik, Band 4 (Verlag Harri Deutsch, Frankfurt, 1984).
- [41] S. Stringari, *Collective Excitations of a Trapped Bose-Condensed Gas*, Phys. Rev. Lett **77**, 2360 (1996).
- [42] M. Fließer, A. Csordás, P. Szépfalusy, and R. Graham. *Hydrodynamic Excitations of Bose Condensates in Anisotropic Traps*, Phys. Rev. **A 56**, R2533 (1997).
- [43] V.M. Pérez-García, H. Michinel, J.I. Chirac, M. Lewenstein, and P. Zoller, *Low Energy Excitations of a Bose-Einstein Condensate: A Time-Dependent Variational Analysis*, Phys. Rev. Lett. **77**, 5320 (1996).
- [44] G.K.S. Wong, P.A. Crowell, H.A. Cho, and J.D. Reppy, *Superfluid Critical Behavior in ⁴Filled Porous Media*, Phys. Rev. Lett. **65**, 2410 (1990).
- [45] M. Kobayashi and M. Tsubota, *Bose-Einstein Condensation and Superfluidity of a Dilute Bose Gas in a Random Potential*, Phys. Rev. **B 66**, 174516 (2002).
- [46] K. Huang and H.-F. Meng, *Hard-Sphere Bose Gas in Random External Potentials*, Phys. Rev. Lett. **69**, 644 (1992).
- [47] A.V. Lopatin and V.M. Vinokur, *Thermodynamics of the Superfluid Dilute Bose Gas with Disorder*, Phys. Rev. Lett. **88**, 235503 (2002).
- [48] D. Belitz and T.R. Kirkpatrick, *The Anderson-Mott Transition* Rev. Mod. Phys. **66**, 261 (1994).
- [49] E. Braaten, H.-W. Hammer, and T. Mehen, *Dilute Bose-Einstein Condensate with Large Scattering Length*, Phys. Rev. Lett. **88**, 040401 (2002).