# Bose-Gas mit schwacher Wechselwirkung

Wir betrachten ein Gas aus $N$ Bosonen in einem Volumen $V$ mit periodischen Randbedingungen. Die Teilchen unterliegen einer repulsiven, kurzreichweitigen Paarwechselwirkung $U(\mathbf{r}) > 0$ mit $U(\mathbf{q}) = \int_V \mathrm{d}^3r\, e^{-i\mathbf{qr}} U(\mathbf{r})$, der Hamilton-Operator lautet

$$H = H^0 + H^{int} \quad , \quad H^0 = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) a^\dagger_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} \quad , \quad \varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$H^{int} = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}} U(\mathbf{q}) a^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} a^\dagger_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}} \tag{1}$$

Die Summen umfassen alle mit den periodischen Randbedingungen konformen Wellenvektoren.

Im Folgenden sei die Temperatur $T = 0$. Im wechselwirkungsfreien System $U(\mathbf{q}) = 0$ ist der Grundzustand $|\Phi_0\rangle$ durch die makroskopische Besetzung des Wellenvektors $\mathbf{k}_0 = 0$ charakterisiert (vollständig kondensiertes Bose-Gas):

$$U(\mathbf{q}) = 0 : \quad a^\dagger_0 a_0 |\Phi_0\rangle = N\, |\Phi_0\rangle \quad , \quad a_0 \equiv a_{\mathbf{k}_0}$$

Es soll angenommen werden, dass auch im wechselwirkenden System $U(\mathbf{q}) > 0$ der Grundzustand $|\widetilde{\Phi}_0\rangle$ eine makroskopische Besetzung von $\mathbf{k}_0 = 0$ aufweist,

$$U(\mathbf{q}) > 0 : \quad a^\dagger_0 a_0 |\widetilde{\Phi}_0\rangle = N_0\, |\widetilde{\Phi}_0\rangle \quad , \quad N_0 < N \quad , \quad \frac{N_0}{N} \sim 1\,. \tag{2}$$

Die Besetzungszahl $N_0$ des Wellenvektors 0 ist jetzt kleiner als die Gesamt-Teilchenzahl $N$, aber immer noch makroskopisch groß.

Wir begründen, dass mit der Annahme (2) die Operatoren $a_0$, $a^\dagger_0$ (näherungsweise) durch Zahlen ersetzt werden dürfen,

$$a_0 = \sqrt{N_0} \quad , \quad a^\dagger_0 = \sqrt{N_0}\,. \tag{3}$$

Für die Erzeuger, Vernichter eines Bosons in einem beliebigen Wellenvektor $\neq 0$ gilt

$$\mathbf{k} \neq 0 : \quad a^\dagger_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} |\widetilde{\Phi}_0\rangle = n_{\mathbf{k}} |\widetilde{\Phi}_0\rangle \quad , \quad a_{\mathbf{k}} a^\dagger_{\mathbf{k}} |\widetilde{\Phi}_0\rangle = (1 + n_{\mathbf{k}}) |\widetilde{\Phi}_0\rangle$$

Die Nichtvertauschbarkeit der Operatoren äußert sich darin, dass die 1 nicht gegen $n_{\mathbf{k}}$ vernachlässigt werden kann, denn

$$\mathbf{k} \neq 0 : \quad n_{\mathbf{k}} \sim 1 \quad \text{für eine schwache Wechselwirkung } U(\mathbf{q})$$

Für das Kondensat gilt dagegen

$$\mathbf{k} = 0 : \quad a^\dagger_0 a_0 |\widetilde{\Phi}_0\rangle = N_0 |\widetilde{\Phi}_0\rangle \quad , \quad a_0 a^\dagger_0 |\widetilde{\Phi}_0\rangle = (1 + N_0) |\widetilde{\Phi}_0\rangle \simeq N_0 |\widetilde{\Phi}_0\rangle$$

Hier kann die 1 vernachlässigt werden, denn

$$\mathbf{k} = 0 : \quad N_0 \sim N \gg 1 \quad \text{für eine schwache Wechselwirkung } U(\mathbf{q})$$

Daher können $a_0$ und $a^\dagger_0$ als vertauschbar angenommen werden, und damit durch c-Zahlen ersetzt werden:

$$\Rightarrow \quad a^\dagger_0 a_0 = a_0 a^\dagger_0 = N_0 \quad \Rightarrow \quad \boxed{a_0 = \sqrt{N_0} e^{i\varphi} \quad , \quad a^\dagger_0 = \sqrt{N_0} e^{-i\varphi}}$$

In der Regel wählt man $\varphi = 0$.

Der Wechselwirkungsterm (1) mit der Näherung (3) übergeht in

$$H^{int} = \frac{U}{2V} \left[ N_0^2 \; + \; N_0 \sum_{\mathbf{k}\neq 0} \left( 4 a^\dagger_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} \; + \; a^\dagger_{\mathbf{k}} a^\dagger_{-\mathbf{k}} + a_{-\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} \right) \right] \tag{4}$$

Dabei werden alle Terme, die kleiner als $\sim N_0$ sind, vernachlässigt (das sind also alle Terme, die weder $a_0$ noch $a_0^\dagger$ enthalten und die Terme, die entweder $a_0$ oder $a_0^\dagger$ einmal enthalten). Hier und im Folgenden soll außerdem angenommen werden, dass $U(\mathbf{q}) = U$ (Kontaktwechselwirkung). Es sei bemerkt, dass Terme $\sim (N_0)^{3/2} \sum_\mathbf{k} a_\mathbf{k}$ oder $\sim (N_0)^{3/2} \sum_\mathbf{k} a_\mathbf{k}^\dagger$ wegen Impulserhaltung nicht auftreten.

Mit $N_0 \gg 1$ braucht eigentlich nur der führende Term $\sim (N_0)^2$ mitgenommen werden. Dann würde aber die durch die Wechselwirkung induzierte Dynamik ganz verschwinden, also geht man einen Term weiter, bis $\sim N_0$.

Die Gesamt-Teilchenzahl ist gegeben durch

$$N = N_0 \; + \; \sum_{\mathbf{k}\neq 0} a_\mathbf{k}^\dagger a_\mathbf{k}$$

Wir benutzen diesen Ausdruck, um $N_0$ aus (4) zu eliminieren, wobei wieder alle Terme, die kleiner sind als $\sim N$, vernachlssigt werden. Ergebnis:

$$H^{int} = \frac{N}{2} U n \; + \; U n \sum_{\mathbf{k}\neq 0} \left[ a_\mathbf{k}^\dagger a_\mathbf{k} \; + \; \frac{1}{2} \big( a_\mathbf{k}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger + a_{-\mathbf{k}} a_\mathbf{k} \big) \right] \quad , \quad n = \frac{N}{V} \tag{5}$$

Um die Eigenwerte des Hamilton-Operators $H = H^0 + H^{int}$, mit dem Wechselwirkungsterm $H^{int}$ aus Gl.(5), zu bestimmen, macht man den Ansatz

$$\mathbf{k} \neq 0 \; : \quad \begin{array}{rcl} a_\mathbf{k} & = & \cosh(\theta)\, \gamma_\mathbf{k} \; - \; \sinh(\theta)\, \gamma_{-\mathbf{k}}^\dagger \\ a_{-\mathbf{k}}^\dagger & = & -\sinh(\theta)\, \gamma_\mathbf{k} \; + \; \cosh(\theta)\, \gamma_{-\mathbf{k}}^\dagger \end{array} \quad , \quad \theta \equiv \theta(\mathbf{k}) \quad , \quad \theta(-\mathbf{k}) = \theta(\mathbf{k}) \tag{6}$$

(Bogoliubov-Transformation) mit den Quasiteilchen-Bose-Operatoren

$$[\, \gamma_\mathbf{k} \, , \, \gamma_\mathbf{q}^\dagger \,] = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{q}} \quad , \quad [\, \gamma_\mathbf{k} \, , \, \gamma_\mathbf{q} \,] = 0$$

Die $\theta(\mathbf{k})$ sind Parameter, die erst noch bestimmt werden müssen.

Wir überprüfen zunächst, dass die Kommutatorrelationen der ursprünglichen $a_\mathbf{k}^{(\dagger)}$ korrekt reproduziert werden.

Sicher erfüllt sind die Kommutatorrelationen für den Fall

$$\mathbf{k} \neq \mathbf{q} \, , \; \mathbf{k} \neq -\mathbf{q} \; : \quad [\, a_\mathbf{k} \, , \, a_\mathbf{q}^{(\dagger)} \,] = 0$$

Für $\mathbf{k} = \mathbf{q}$ oder $\mathbf{k} = -\mathbf{q}$ sollte man das nachprüfen: Mit

$$\mathrm{sh} \equiv \sinh(\theta(\mathbf{k})) \quad , \quad \mathrm{ch} \equiv \cosh(\theta(\mathbf{k}))$$

folgt

$$\begin{aligned} [\, a_\mathbf{k} \, , \, a_\mathbf{k} \,] &= [\, (\mathrm{ch}\, \gamma_\mathbf{k} - \mathrm{sh}\, \gamma_{-\mathbf{k}}^\dagger) \, , \, (\mathrm{ch}\, \gamma_\mathbf{k} - \mathrm{sh}\, \gamma_{-\mathbf{k}}^\dagger) \,] \\ &= 0 \\ [\, a_\mathbf{k} \, , \, a_{-\mathbf{k}} \,] &= [\, (\mathrm{ch}\, \gamma_\mathbf{k} - \mathrm{sh}\, \gamma_{-\mathbf{k}}^\dagger) \, , \, (\mathrm{ch}\, \gamma_{-\mathbf{k}} - \mathrm{sh}\, \gamma_\mathbf{k}^\dagger) \,] \\ &= -\mathrm{ch}\, \mathrm{sh}\, [\, \gamma_\mathbf{k} \, , \, \gamma_\mathbf{k}^\dagger \,] - \mathrm{sh}\, \mathrm{ch}\, [\, \gamma_{-\mathbf{k}}^\dagger \, , \, \gamma_{-\mathbf{k}} \,] \\ &= 0 \\ [\, a_\mathbf{k} \, , \, a_\mathbf{k}^\dagger \,] &= [\, (\mathrm{ch}\, \gamma_\mathbf{k} - \mathrm{sh}\, \gamma_{-\mathbf{k}}^\dagger) \, , \, (-\mathrm{sh}\, \gamma_{-\mathbf{k}} + \mathrm{ch}\, \gamma_\mathbf{k}^\dagger) \,] \\ &= (\mathrm{ch}\,)^2 [\, \gamma_\mathbf{k} \, , \, \gamma_\mathbf{k}^\dagger \,] + (\mathrm{sh}\,)^2 [\, \gamma_{-\mathbf{k}}^\dagger \, , \, \gamma_{-\mathbf{k}} \,] \\ &= (\mathrm{ch}\,)^2 - (\mathrm{sh}\,)^2 = 1 \\ [\, a_\mathbf{k} \, , \, a_{-\mathbf{k}}^\dagger \,] &= [\, (\mathrm{ch}\, \gamma_\mathbf{k} - \mathrm{sh}\, \gamma_{-\mathbf{k}}^\dagger) \, , \, (-\mathrm{sh}\, \gamma_\mathbf{k} + \mathrm{ch}\, \gamma_{-\mathbf{k}}^\dagger) \,] \\ &= 0 \end{aligned}$$

Der Hamilton-Operator lautet bis jetzt:

$$H = \frac{N}{2} U n \; + \; \sum_{\mathbf{k}\neq 0} \left[ \big( \varepsilon(\mathbf{k}) + U n \big) a_\mathbf{k}^\dagger a_\mathbf{k} \; + \; \frac{U n}{2} \big( a_\mathbf{k}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger + a_{-\mathbf{k}} a_\mathbf{k} \big) \right] \quad , \quad n = \frac{N}{V}$$

Jetzt die Transformation einsetzen, ausmultiplizieren und nach Art der Terme zusammenfassen:

$$
\begin{aligned}
\Rightarrow \quad H \;=\; & \frac{N}{2}Un \;+ \\
& + \sum_{\mathbf{k}\neq 0}\Bigg[\gamma_{-\mathbf{k}}\gamma_{\mathbf{k}}\Big\{\big(\varepsilon(\mathbf{k})+Un\big)(-\mathrm{sh}\,\mathrm{ch}\,) + \frac{Un}{2}\big((\mathrm{sh}\,)^2+(\mathrm{ch}\,)^2\big)\Big\} \;+ \\
& \quad + \gamma^\dagger_{\mathbf{k}}\gamma^\dagger_{-\mathbf{k}}\Big\{\big(\varepsilon(\mathbf{k})+Un\big)(-\mathrm{sh}\,\mathrm{ch}\,) + \frac{Un}{2}\big((\mathrm{sh}\,)^2+(\mathrm{ch}\,)^2\big)\Big\} \;+ \\
& \quad + \gamma^\dagger_{\mathbf{k}}\gamma_{\mathbf{k}}\Big\{\big(\varepsilon(\mathbf{k})+Un\big)(\mathrm{ch}\,)^2 - Un(\mathrm{sh}\,\mathrm{ch}\,)\Big\} \;+ \\
& \quad + \gamma_{-\mathbf{k}}\gamma^\dagger_{-\mathbf{k}}\Big\{\big(\varepsilon(\mathbf{k})+Un\big)(\mathrm{sh}\,)^2 - Un(\mathrm{sh}\,\mathrm{ch}\,)\Big\}\Bigg]
\end{aligned}
$$

Die Transformation ist nur dann nützlich, wenn dadurch die anomalen Terme $\sim \gamma\gamma\,,\ \sim \gamma^\dagger\gamma^\dagger$ verschwinden. Wir verlangen also, da

$$\big(\varepsilon(\mathbf{k})+Un\big)(-\mathrm{sh}\,\mathrm{ch}\,) \;+\; \frac{Un}{2}\big((\mathrm{sh}\,)^2+(\mathrm{ch}\,)^2\big) = 0$$

Mit

$$(\mathrm{sh}\,)^2+(\mathrm{ch}\,)^2 = \cosh(2\,\theta(\mathbf{k})) \quad , \quad 2\mathrm{sh}\,\mathrm{ch}\, = \sinh(2\,\theta(\mathbf{k}))$$

folgt

$$\Rightarrow \quad \boxed{\tanh(2\,\theta(\mathbf{k})) = \frac{U\,n}{\varepsilon(\mathbf{k})+U\,n}}$$

Vom Hamiltonian bleibt jetzt noch übrig, mit

$$\gamma_{-\mathbf{k}}\gamma^\dagger_{-\mathbf{k}} = 1 + \gamma^\dagger_{-\mathbf{k}}\gamma_{-\mathbf{k}}$$

und $\mathbf{k}\to-\mathbf{k}$ unter der Summe,

$$H = \frac{N}{2}Un \;+\; \sum_{\mathbf{k}\neq 0}\gamma^\dagger_{\mathbf{k}}\gamma_{\mathbf{k}}\big[\,(\varepsilon+Un)\,(\mathrm{ch}\,^2+\mathrm{sh}\,^2) - 2Un(\mathrm{sh}\,\mathrm{ch}\,)\,\big] \;+\; \sum_{\mathbf{k}\neq 0}\big[\,(\varepsilon+Un)\,(\mathrm{sh}\,)^2 - Un(\mathrm{sh}\,\mathrm{ch}\,)\,\big]$$

Jetzt kann man noch versuchen, den letzten Term dem zweiten Term möglichst ähnlich zu machen,

$$(\mathrm{ch}\,)^2-(\mathrm{sh}\,)^2 = 1 \quad \Rightarrow \quad (\mathrm{sh}\,)^2 = \frac{1}{2}[\,(\mathrm{sh}\,)^2+(\mathrm{sh}\,)^2\,] = \frac{1}{2}[\,(\mathrm{sh}\,)^2+(\mathrm{ch}\,)^2-1\,]$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{H = \left[\frac{N}{2}Un \;-\; \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\big(\varepsilon(\mathbf{k})+U\,n\big)\right] \;+\; \sum_{\mathbf{k}\neq 0}E(\mathbf{k})\Big(\gamma^\dagger_{\mathbf{k}}\gamma_{\mathbf{k}} \;+\; \frac{1}{2}\Big)}$$

mit der Dispersion

$$\boxed{E(\mathbf{k}) = \big[\,(\varepsilon(\mathbf{k})+U\,n)\,(\mathrm{ch}\,^2+\mathrm{sh}\,^2) \;-\; 2U\,n\,(\mathrm{sh}\,\mathrm{ch}\,)\,\big] \;=\; \big[\,(\varepsilon(\mathbf{k})+U\,n)\,\cosh(2\,\theta) \;-\; U\,n\,\sinh(2\,\theta)\,\big]}$$

Mit den Formeln

$$\sinh^2(x) = \frac{\tanh^2(x)}{1-\tanh^2(x)} \quad , \quad \cosh^2(x) = \frac{1}{1-\tanh^2(x)}$$

folgt

$$\sinh(2\,\theta) = \frac{Un}{\sqrt{(\varepsilon+Un)^2-(Un)^2}} \quad , \quad \cosh(2\,\theta) = \frac{(\varepsilon+Un)}{\sqrt{(\varepsilon+Un)^2-(Un)^2}}$$

und damit

$$\Rightarrow \quad \boxed{E(\mathbf{k}) = \sqrt{\big(\varepsilon(\mathbf{k}) + Un\big)^2 \; - \; \big(Un\big)^2}}$$

Große $\mathbf{k}$ :

$$\varepsilon(\mathbf{k}) \gg Un \; : \quad E(\mathbf{k}) \simeq \sqrt{\varepsilon(\mathbf{k})^2} = \varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \Rightarrow \quad \text{freie Bosonen}$$

Kleine $\mathbf{k}$ :

$$\varepsilon(\mathbf{k}) \ll Un \; : \quad E(\mathbf{k}) \simeq \sqrt{2Un\,\varepsilon(\mathbf{k})} = c\,k \;\; , \quad c = \hbar\sqrt{Un/m} \quad \Rightarrow \quad \text{Schallwellen}$$

Der Grundzustand ist der Zustand niedrigster Energie. Der Hamiltonian besteht offensichtlich aus einer c-Zahl plus einem Satz harmonischer Oszillatoren (für jedes $\mathbf{k} \neq 0$ einer, analog zu Phononen). Im Grundzustand ist keiner der Oszillatoren angeregt, also

$$\boxed{\gamma_{\mathbf{k}} |\widetilde{\Phi}_0\rangle = 0 \;\; , \quad \forall\, \mathbf{k} \neq 0}$$