

Theorie der Kondensierten Materie I WS 2018/19

Prof. Dr. A. Shnirman
PD Dr. B. Narozhny, M.Sc. T. LüdwigBlatt 8
Lösungsvorschlag

1. Operatoren in zweiter Quantisierung:

In der Vorlesung wurde die Darstellung bosonischer Einteilchenoperatoren in zweiter Quantisierung hergeleitet. Für Einteilchen-Operatoren gab es zwei mögliche Matrixelemente, diagonale und nicht-diagonale. Für Zweiteilchen-Operatoren gibt es hingegen mehrere diagonale und nicht-diagonale Matrixelemente.

Wir wiederholen zunächst, wie das mit den Einteilchenoperatoren funktioniert. Die Einteilchenzustände seien $\phi_i(x)$, wobei i die Quantenzahl (z.B. Impuls) und x die Koordinate (z.B. Ort) bezeichnet. Der symmetrische Produktzustand wird dann als

$$\Psi_s(N_1, N_2, \dots) = \sqrt{\frac{N_1! N_2! \dots}{N!}} \sum_{P \in S_N^*} [\phi_{P(1)}(1) \phi_{P(2)}(2) \dots \phi_{P(N)}(N)]$$

geschrieben. In dieser Notation sind die großen Zahlen als Abkürzung für die Koordinaten zu verstehen, z.B. $3 \equiv x_3$. Die Zahl in (bspw.) $P(3)$ bezeichnet eine Permutation der Quantenzahl an der Position $a = 3$.

Das Skalarprodukt wird wie üblich in der Quantenmechanik definiert:

$$\int dX \phi_{P(i)}^*(X) \phi_{\tilde{P}(j)}(X) \equiv \langle P(i) | \tilde{P}(j) \rangle .$$

Zu Demonstrationszwecken überprüfen wir die Norm des symmetrisierten bosonischen Vielteilchenzustands:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_s | \Psi_s \rangle &= \frac{N_1! N_2! \dots}{N!} \sum_{P, \tilde{P}} \underbrace{\langle P(1) | \tilde{P}(1) \rangle \langle P(2) | \tilde{P}(2) \rangle \dots}_{\delta_{P, \tilde{P}}} \\ &= \frac{N_1! N_2! \dots}{N!} \sum_P \\ &= \frac{N_1! N_2! \dots}{N!} \frac{N!}{N_1! N_2! \dots} = 1 \end{aligned}$$

Bleibt also die Frage, warum wir dieses mal nicht einfach wieder $N!$ geschrieben haben für die Summe über alle Permutationen. Der Grund ist, dass Der Vorfaktor berücksichtigt alle "erlaubten" Permutationen (eine nicht erlaubte Permutation wäre es, wenn zwei Zustände i und i' identisch sind und wir permutieren würden). (Für Fermionen kann es so eine Situation wegen des Pauli-Prinzips natürlich nicht geben.) Um nur die erlaubten Permutationen mitzuzählen, dividiert man diese wieder raus, indem man die

Fakultäten der Besetzungszahlen in den Nenner schreibt. Da die Gruppe der “erlaubten” Permutationen nicht S_N (alle Permutationen) ist, haben wir in der Definition von Ψ_s “ $P \in S_N^*$ ” geschrieben. Der Vorfaktor bei diesem Produktzustand war also sinnvoll gewählt. Im folgenden schreiben wir einfach $|\Psi_s(N_1, N_2, \dots)\rangle \equiv |N_1, N_2, \dots\rangle$.

Nun fangen wir aber endlich mit Einteilchenoperatoren an, zuerst die Diagonalelemente für Bosonen. Es gilt ja

$$\langle F^{(1)} \rangle = \sum_{a=1}^N \langle f_{x_a}^{(1)} \rangle$$

daher berechnen wir jetzt erstmal nur das Matrixelement von $f^{(1)}$.

$$\begin{aligned} \langle N_1, N_2, \dots | f_{x_a}^{(1)} | N_1, N_2, \dots \rangle &= \frac{N_1! N_2! \dots}{N!} \sum_{P, \tilde{P}} \langle P(1) | \tilde{P}(1) \rangle \dots \langle P(a) | f_{x_a}^{(1)} | \tilde{P}(a) \rangle \dots \\ &= \frac{N_1! N_2! \dots}{N!} \sum_P \langle P(a) | f_{x_a}^{(1)} | \tilde{P}(a) \rangle \end{aligned}$$

Im letzten Schritt ist folgendes passiert: Der Operator sitzt bei der Position a , für alle anderen Teilchen passiert gar nichts. Wegen der Orthonormiertheit der Einteilchenzustände muss gelten $P(1) = \tilde{P}(1)$, $P(2) = \tilde{P}(2)$ etc. Nur für $P(a)$ und $\tilde{P}(a)$ muss das nicht gelten, denn $f^{(1)}$ ist ja nicht notwendigerweise diagonal in den $\phi_i(X)$. Allerdings: wenn $P = \tilde{P}$ für alle bis auf eine der Zahlen $1 \dots N$ gilt, dann liegt auch diese letzte Zahl fest: $P(a) = \tilde{P}(a)$, also gilt doch $P = \tilde{P}$ für alle $1 \dots N$.

Und so geht es jetzt weiter: eine Permutation P bauen wir auf, indem wir für $i = P(a)$ eine der Quantenzahlen $1, \dots, N$ wählen, das ergibt eine Summe $\sum_{i=1}^N$. Jetzt läuft die Summe über alle Permutationen also nur noch über die verbliebenen $N - 1$ Zahlen, das ergibt $(N - 1)!$ identische Beiträge, allerdings müssen wir wieder die “falschen” Permutationen rausdividieren. Hierbei muss man beachten, dass von den ursprünglichen N_i Teilchen im i -ten Zustand nur noch $N_i - 1$ zur Verfügung stehen. Schließlich erhalten wir

$$\begin{aligned} \langle N_1, N_2, \dots | f_{x_a}^{(1)} | N_1, N_2, \dots \rangle &= \frac{N_1! N_2! \dots}{N!} \sum_{i=1}^N \langle i | f^{(1)} | i \rangle \frac{(N - 1)!}{N_1! \dots (N_i - 1)! \dots} \\ &= \sum_{i=1}^N \frac{N_i}{N} \langle i | f^{(1)} | i \rangle \end{aligned}$$

Damit erhalten wir das Endresultat, indem wir die Summe über a ausführen. Dabei stellen wir fest, dass jeder der N Beiträge in dieser Summe identisch aussieht und die Summe einfach als Faktor N eingeht:

$$\langle N_1, N_2, \dots | F^{(1)} | N_1, N_2, \dots \rangle = \sum_{a=1}^N \sum_{i=1}^N \frac{N_i}{N} \langle i | f^{(1)} | i \rangle = \sum_i N_i \langle i | f^{(1)} | i \rangle$$

Nun zu den nichtdiagonalen Matrixelementen:

$$\begin{aligned}
& \langle \dots, N_i, \dots, N_j - 1, \dots | f_{x_a}^{(1)} | \dots, N_i - 1, \dots, N_j, \dots \rangle \\
&= \frac{N_1! \dots N_{i-1}! N_{i+1}! \dots N_{j-1}! N_{j+1}! \dots}{N!} \sqrt{N_i! (N_i - 1)! N_j! (N_j - 1)!} \times \\
& \sum_{P, \tilde{P}} \langle P(1) | \tilde{P}(1) \rangle \langle P(2) | \tilde{P}(2) \rangle \dots \langle P(a) | f_{x_a}^{(1)} | \tilde{P}(a) \rangle \dots
\end{aligned}$$

Diesmal müssen wir $P(a) = i$ und $\tilde{P}(a) = j$ wählen, desweiteren müssen alle Permutationen P und \tilde{P} gleich sein (mit der selben Argumentation wie bei den Diagonalelementen):

$$= \frac{N_1! \dots N_{i-1}! N_{i+1}! \dots N_{j-1}! N_{j+1}! \dots}{N!} \sqrt{N_i! (N_i - 1)! N_j! (N_j - 1)!} \sum_P \langle i | f^{(1)} | j \rangle$$

Wiederum sind nur noch $N - 1$ Teilchen übrig zum Auspermutieren und beim Wegdividieren der "falschen" Permutationen haben wir nur $N_i - 1$ und $N_j - 1$ Teilchen:

$$\begin{aligned}
&= \frac{N_1! \dots N_{i-1}! N_{i+1}! \dots N_{j-1}! N_{j+1}! \dots}{N!} \sqrt{N_i! (N_i - 1)! N_j! (N_j - 1)!} \langle i | f^{(1)} | j \rangle \times \\
& \frac{(N - 1)!}{N_1! \dots (N_i - 1)! (N_j - 1)! \dots} \\
&= \frac{\sqrt{N_i N_j}}{N} \langle i | f^{(1)} | j \rangle
\end{aligned}$$

Ausführen der Summe über a eliminiert wieder das N im Nenner und wir finden wie gewünscht das nicht-diagonale Matrixelement als $\langle F^{(1)} \rangle = \sqrt{N_i N_j} \langle i | f^{(1)} | j \rangle$.

Um zu sehen, dass die Ergebnisse kompakt als

$$F^{(1)} = \sum_{ij} \langle i | f^{(1)} | j \rangle a_i^\dagger a_j$$

geschrieben werden können, berechnet man einfach damit die Matrixelemente:

$$\begin{aligned}
& \sum_{ij} \langle N_1, N_2, \dots | \langle i | f^{(1)} | j \rangle a_i^\dagger a_j | N_1, N_2, \dots \rangle \\
&= \sum_{ij} \langle i | f^{(1)} | j \rangle \sqrt{N_i N_j} \delta_{ij} = \sum_i \langle i | f^{(1)} | i \rangle N_i \quad (1)
\end{aligned}$$

Für Nicht-Diagonalelemente:

$$\begin{aligned}
& \sum_{ij} \langle \dots, N_i, \dots, N_j - 1, \dots | \langle i | f^{(1)} | j \rangle a_i^\dagger a_j | \dots, N_i - 1, \dots, N_j, \dots \rangle \\
&= \langle i | f^{(1)} | j \rangle \sqrt{N_i N_j} \quad (2)
\end{aligned}$$

Die Summen fallen hier weg, da es nur genau einen Beitrag gibt, und zwar genau dann, wenn a_i^\dagger auf den Zustand i wirkt und a_j auf den Zustand j , in den übrigen Fällen bekommt man 0 wegen der Orthogonalität der Zustände.

Bitte nicht verwirren lassen: i und j sind zum einen Summationsindizes, zum anderen sind aber i und j gerade die beiden Zustände, an denen ein Teilchen ausgetauscht wird - man hätte also vielleicht (aus pädagogischer Sicht) besser i_0 und j_0 als Bezeichnung der Zustände genommen...

Zwei-Teilchen Operatoren:

Nach diesem Vorspiel kommen wir nun endlich zu den Zwei-Teilchenoperatoren. Dank des Vorspiels sollte das jetzt recht schnell gehen. Es gilt $F^{(2)} = \sum_{a<b} f^{(2)}$ - es wird sich wieder zeigen, dass $\langle f^{(2)} \rangle$ für beliebige Positionen a und b identisch ist. Machen Sie sich also schon einmal klar, dass die Summe $\sum_{a<b}$ gerade einen Faktor $N(N-1)/2$ liefern wird!

Diagonalelemente für Bosonen:

$$\begin{aligned} \langle N_1, N_2, \dots | f_{x_a x_b}^{(2)} | N_1, N_2, \dots \rangle &= \frac{N_1! N_2! \dots}{N!} \sum_{P, \tilde{P}} \dots \langle P(a) P(b) | f_{x_a x_b}^{(2)} | \tilde{P}(a) \tilde{P}(b) \rangle \\ &= \frac{N_1! N_2! \dots}{N!} \sum_P \langle P(a) P(b) | f_{x_a x_b}^{(2)} | \tilde{P}(b) \tilde{P}(a) \rangle \end{aligned}$$

Hier muss man nun zwei Fälle unterscheiden: entweder wirkt $f^{(2)}$ auf zwei Einteilchenzustände mit derselben Quantenzahl i oder auf zwei Einteilchenzustände mit verschiedenen Quantenzahlen i und j .

$$= \begin{cases} \frac{N_1! N_2! \dots}{N!} \sum_i \langle ii | f^{(2)} | ii \rangle \frac{(N-2)!}{N_1! \dots (N_i-2)! \dots} = \sum_i \frac{N_i(N_i-1)}{N(N-1)} \langle ii | f^{(2)} | ii \rangle \\ = \dots = \sum_{ij} \frac{N_i N_j}{N(N-1)} \left(\langle ij | f^{(2)} | ji \rangle + \langle ij | f^{(2)} | ij \rangle \right) \end{cases}$$

Also erhalten wir

$$\langle F^{(2)} \rangle = \sum_{a<b} \sum_i \frac{N_i(N_i-1)}{N(N-1)} \langle ii | f^{(2)} | ii \rangle = \frac{1}{2} \sum_i \langle ii | f^{(2)} | ii \rangle N_i(N_i-1)$$

oder

$$\langle F^{(2)} \rangle = \frac{1}{2} \sum_{ij} \left(\langle ij | f^{(2)} | ji \rangle + \langle ij | f^{(2)} | ij \rangle \right) N_i N_j .$$

Noch ein Wort zu den Permutationen. Die \sum_P haben wir wie folgt ausgeführt: Wir wählen für $i = P(a)$ und für $j = P(b)$ (und umgekehrt) jeweils eine Zahl aus der Menge $1 \dots N$ aus, die verbleibenden $(N-2)$ Zahlen werden auspermutiert, das ergibt den Faktor $(N-2)!$.

Das erste Matrixelement kann es für Fermionen nicht geben (keine Doppelbesetzung wegen Pauli-Prinzip), nur das zweite. Während für Fermionen die N_i 's trivialerweise 1

sind, müssen wir jetzt mit den Minuszeichen aufpassen:

$$\begin{aligned} \langle N_1, N_2, \dots | f_{x_a x_b}^{(2)} | N_1, N_2, \dots \rangle &= \frac{1}{N!} \sum_{P, \tilde{P}} (-1)^{X_P} (-1)^{X_{\tilde{P}}} \dots \langle P(a)P(b) | f_{x_a x_b}^{(2)} | \tilde{P}(a)\tilde{P}(b) \rangle \\ &= \frac{1}{N!} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left(\langle ij | f^{(2)} | ij \rangle - \langle ij | f^{(2)} | ji \rangle \right) (N-2)! \end{aligned}$$

$$\boxed{\langle F^{(2)} \rangle = \sum_{i,j} \frac{1}{2} \left(\langle ij | f^{(2)} | ij \rangle - \langle ij | f^{(2)} | ji \rangle \right)}$$

Für eine gegebene Permutation P , also die Liste $P(1), P(2), \dots, P(i), P(j), \dots, P(N)$, gilt nun $P(1) = \tilde{P}(1), P(2) = \tilde{P}(2), \dots$, außer für a und b . Hier bleiben zwei Möglichkeiten für \tilde{P} übrig: $P(a) = \tilde{P}(a), P(b) = \tilde{P}(b)$ und $P(a) = \tilde{P}(b), P(b) = \tilde{P}(a)$, dabei hat die erste ein positives Vorzeichen (keine Transposition relativ zu P), die zweite ein negatives (eine Transposition). Die \sum_P haben wir dann wie folgt ausgeführt: Wir wählen für $i = P(a)$ eine Zahl aus der Menge $1 \dots N$ aus und für $j = P(b)$ eine beliebige andere (Fermionen!), die verbleibenden $(N-2)$ Zahlen werden auspermutiert, das ergibt den Faktor $(N-2)!$.

Nicht-Diagonalelemente für Bosonen:

$$\begin{aligned} \langle N_i, \dots, N_j, \dots, N_l - 1 | f_{x_a x_b}^{(2)} | N_i - 1, \dots, N_j, \dots, N_l \rangle &= \\ \frac{N_1! \dots N_j! \dots}{N!} \sqrt{N_i!(N_i - 1)! N_l!(N_l - 1)!} \sum_{P, \tilde{P}} \dots \langle P(a)P(b) | f_{x_a x_b}^{(2)} | \tilde{P}(a)\tilde{P}(b) \rangle \\ &= \frac{\dots}{\dots} \sqrt{\dots} \sum_j \left(\langle ij | f^{(2)} | lj \rangle + \langle ij | f^{(2)} | jl \rangle \right) \frac{(N-2)!}{N_1! \dots (N_i - 1)! (N_j - 1)! (N_l - 1)! \dots} \\ &= \sum_j \frac{N_j \sqrt{N_i N_l}}{N(N-1)} \left(\langle ij | f^{(2)} | lj \rangle + \langle ij | f^{(2)} | jl \rangle \right) \end{aligned}$$

$$\boxed{\langle F^{(2)} \rangle = \sum_j \frac{1}{2} N_j \sqrt{N_i N_l} \left(\langle ij | f^{(2)} | lj \rangle + \langle ij | f^{(2)} | jl \rangle \right)}$$

Ganz analog findet man für Bosonen folgende nicht-diagonale Matrix-Elemente:

$$\begin{aligned} \langle \dots N_i \dots N_j - 1 \dots N_l \dots N_m - 1 \dots | F^{(2)} | \dots N_i - 1 \dots N_j \dots N_l - 1 \dots N_m \dots \rangle \\ = \frac{1}{2} \sqrt{N_i N_j N_l N_m} \left(\langle il | f^{(2)} | jm \rangle + \langle il | f^{(2)} | mj \rangle \right) \quad (3) \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} \langle \dots N_i \dots N_l - 2 \dots | F^{(2)} | \dots N_i - 2 \dots N_l \dots \rangle \\ = \frac{1}{2} \sqrt{N_i(N_i - 1) N_l(N_l - 1)} \langle ii | f^{(2)} | ll \rangle \quad (4) \end{aligned}$$

2. Thermodynamische Störungstheorie:

Es geht um ein Gas spinloser Bosonen der Masse m in einem Volumen $V = L^3$, mit periodischen Randbedingungen für die Wellenfunktionen. Die Teilchen wechselwirken über ein Potential $U(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = U_0 \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ mit $U_0 > 0$. Ausgedrückt in zweiter Quantisierung hat der Wechselwirkungsteil des Hamiltonoperators ($\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{U}$) die Form

$$\hat{U} = \frac{U_0}{2V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4} \hat{a}_{\mathbf{k}_3}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_4}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_2} \hat{a}_{\mathbf{k}_1} \quad (5)$$

Das chemische Potential μ und die Temperatur T sind vorgegeben.

(a) *Betrachten Sie \hat{U} als kleine Störung und zeigen Sie, dass die Korrektur erster Ordnung in U_0 zum großkanonischen Potential gegeben ist durch*

$$\delta\Omega = \langle \hat{U} \rangle_{H_0} = \frac{\text{tr} \left\{ \hat{U} e^{-\beta(\hat{H}_0 - \mu \hat{N})} \right\}}{\text{tr} \left\{ e^{-\beta(\hat{H}_0 - \mu \hat{N})} \right\}}. \quad (6)$$

Wir betrachten zunächst den ungestörten Fall, also das aus der Vorlesung und den Übungen bekannte Bose-Gas mit $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m}$. Energieeigenzustände und Impulseigenzustände sind identisch, die Vielteilchenzustände $|\alpha\rangle$ sind vollständig charakterisiert durch die Besetzungszahlen $N_{\mathbf{k}}$ der Zustände \mathbf{k} . Die großkanonische Zustandssumme ist

$$Z_G^{(0)} = \text{tr} e^{-\beta(\hat{H}_0 - \mu \hat{N})} = \sum_{\{\alpha\}} e^{-\beta(E_\alpha - \mu N_\alpha)} \quad (7)$$

mit den Energien $E_\alpha = \langle \alpha | \hat{H}_0 | \alpha \rangle = \sum_{\mathbf{k}} N_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}}$. Bei der Summe über die Vielteilchenzustände muss über jede Besetzungszahl $N_{\mathbf{k}}$ von 0 bis ∞ summiert werden. Das großkanonische Potential ist

$$\Omega^{(0)} = -k_B T \ln Z_G^{(0)}. \quad (8)$$

Wie sieht das beim vollen Problem inklusive der Störung aus? Die Eigenbasis zu \hat{H} sei gegeben durch Vielteilchenzustände $|\tilde{\alpha}\rangle$, wobei die Energieniveaus nicht bekannt sind. Mit der Eigenbasis, $\hat{H} |\tilde{\alpha}\rangle = E_{\tilde{\alpha}} |\tilde{\alpha}\rangle$ können wir schreiben

$$Z_G = \text{tr} e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} = \sum_{\{\tilde{\alpha}\}} e^{-\beta(E_{\tilde{\alpha}} - \mu N_{\tilde{\alpha}})}. \quad (9)$$

Da \hat{U} eine kleine Störung sein soll, können wir das volle großkanonische Potential in U_0 entwickeln:

$$\Omega = \Omega^{(0)} + \delta\Omega = \Omega^{(0)} - \frac{k_B T}{Z_G^{(0)}} \left. \frac{\partial Z_G}{\partial U_0} \right|_{U_0=0} U_0. \quad (10)$$

Die Ableitung ist

$$\frac{\partial Z_G}{\partial U_0} = -\beta \sum_{\{\tilde{\alpha}\}} \frac{\partial E_{\tilde{\alpha}}}{\partial U_0} e^{-\beta(E_{\tilde{\alpha}} - \mu N_{\tilde{\alpha}})}. \quad (11)$$

Da die Störung klein ist können wir annehmen, dass die gestörten Vielteilchenzustände $|\tilde{\alpha}\rangle$ ungefähr den ungestörten Zuständen $|\alpha\rangle$ entsprechen. Die Energien $E_{\tilde{\alpha}}$ können wir mit der zeitunabhängigen Störungstheorie näherungsweise berechnen, wir nehmen dabei an, dass die Zustände nicht entartet sind. Dann ist

$$E_{\tilde{\alpha}} = E_{\alpha} + \langle \alpha | \hat{U} | \alpha \rangle . \quad (12)$$

Die Ableitung in (10) ist also

$$\left. \frac{\partial Z_G}{\partial U_0} \right|_{U_0=0} = -\beta \sum_{\{\alpha\}} \frac{\langle \alpha | \hat{U} | \alpha \rangle}{U_0} e^{-\beta(E_{\alpha} - \mu N_{\alpha})} . \quad (13)$$

Die Korrektur zum großkanonischen Potential können wir dann schreiben als

$$\begin{aligned} \delta\Omega &= -\frac{k_B T}{Z_G^{(0)}} (-\beta) \sum_{\{\alpha\}} \langle \alpha | \hat{U} | \alpha \rangle e^{-\beta(E_{\alpha} - \mu N_{\alpha})} = \frac{\sum_{\{\alpha\}} \langle \alpha | \hat{U} | \alpha \rangle e^{-\beta(E_{\alpha} - \mu N_{\alpha})}}{Z_G^{(0)}} \quad (14) \\ &= \frac{\text{tr} \left\{ \hat{U} e^{-\beta(\hat{H}_0 - \mu \hat{N})} \right\}}{Z_G^{(0)}} = \langle \hat{U} \rangle_{H_0} . \end{aligned}$$

Die Größe $\langle \hat{U} \rangle_{H_0}$ ist gerade der thermische Erwartungswert des Operators \hat{U} im ungestörten System.

- (b) Berechnen Sie $\delta\Omega$. Im relevanten Matrixelement können entweder zwei Bosonen in unterschiedlichen Zuständen $\vec{k}_1 \neq \vec{k}_2$ oder im gleichen Zustand $\vec{k}_1 = \vec{k}_2$ erzeugt werden, betrachten Sie diese beiden Fälle separat.

Um $\delta\Omega$ mit (14) zu berechnen brauchen wir die Matrixelemente $\langle \alpha | \hat{U} | \alpha \rangle$ des Operators

$$\hat{U} = \frac{U_0}{2V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4} \hat{a}_{\mathbf{k}_3}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}_4}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}_2} \hat{a}_{\mathbf{k}_1} \quad (15)$$

Die symmetrischen Vielteilchenzustände sind $|\alpha\rangle = |\dots, N_{\mathbf{k}}, \dots\rangle$. Um nichtverschwindende Matrixelemente zu erhalten müssen Anfangs- und Endzustände gleich sein. Die Vernichtungsoperatoren $\hat{a}_{\mathbf{k}_1}$ und $\hat{a}_{\mathbf{k}_2}$ können entweder auf den gleichen Zustand oder auf zwei unterschiedliche Zustände wirken, diese beiden Fälle betrachten wir separat. In jedem Fall sind alle Operatoren bosonisch und die Zustände symmetrisch, deshalb müssen wir keine Rücksicht auf die Reihenfolge nehmen.

- Fall $\mathbf{k}_1 \neq \mathbf{k}_2$: Der Beitrag zum Matrixelement $\langle \alpha | \hat{U} | \alpha \rangle$ ist

$$\frac{U_0}{2V} \sum_{\mathbf{k}_i}^{\mathbf{k}_1 \neq \mathbf{k}_2} \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4} \langle \dots, N_{\mathbf{k}_3}, \dots, N_{\mathbf{k}_4}, \dots | \hat{a}_{\mathbf{k}_3}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}_4}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}_2} \hat{a}_{\mathbf{k}_1} | \dots, N_{\mathbf{k}_1}, \dots, N_{\mathbf{k}_2}, \dots \rangle \quad (16)$$

Es gibt zwei Möglichkeiten: entweder $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_3$ und $\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_4$ oder $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_4$ und $\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_3$, die Beiträge sind identisch, das ergibt einen Faktor 2. Also wird (16) zu

$$\frac{U_0}{V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}^{\mathbf{k}_1 \neq \mathbf{k}_2} \langle \alpha | \hat{a}_{\mathbf{k}_2}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}_2} \hat{a}_{\mathbf{k}_1}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}_1} | \alpha \rangle = \frac{U_0}{V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}^{\mathbf{k}_1 \neq \mathbf{k}_2} \langle \alpha | \hat{n}_{\mathbf{k}_2} \hat{n}_{\mathbf{k}_1} | \alpha \rangle = \frac{U_0}{V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}^{\mathbf{k}_1 \neq \mathbf{k}_2} N_{\mathbf{k}_1} N_{\mathbf{k}_2} \quad (17)$$

Um den Beitrag zu $\delta\Omega$ zu erhalten setzen wir das Matrixelement in (14) ein:

$$\frac{U_0}{V} \frac{\sum_{\{\alpha\}} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}^{\mathbf{k}_1 \neq \mathbf{k}_2} N_{\mathbf{k}_1} N_{\mathbf{k}_2} e^{-\beta(E_\alpha - \mu N_\alpha)}}{Z_G^{(0)}} . \quad (18)$$

Jetzt erinnern wir uns, dass man die großkanonische Zustandssumme als Produkt der Zustandssummen der einzelnen Energieniveaus schreiben kann, $Z_G^{(0)} = \prod_{\mathbf{k}} Z_{\mathbf{k}}$. Der Ausdruck oben enthält also gerade die Wahrscheinlichkeiten $W_{\mathbf{k}} = e^{-\beta N_{\mathbf{k}}(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)} / Z_{\mathbf{k}}$, dass ein Zustand \mathbf{k} mit $N_{\mathbf{k}}$ Teilchen besetzt ist:

$$\frac{e^{-\beta(E_\alpha - \mu N_\alpha)}}{Z_G^{(0)}} = \frac{e^{-\beta \sum_{\mathbf{k}} N_{\mathbf{k}}(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)}}{\prod_{\mathbf{k}} Z_{\mathbf{k}}} = \prod_{\mathbf{k}} W_{\mathbf{k}} . \quad (19)$$

Die Summe $\sum_{\{\alpha\}}$ in (18) summiert über alle $N_{\mathbf{k}} = 0, \dots, \infty$, wir erinnern uns an die Definition der Bose-Funktion, als Mittelwert

$$n_B(\epsilon_{\mathbf{k}}) = \sum_{N_{\mathbf{k}}=0}^{\infty} W_{\mathbf{k}} N_{\mathbf{k}} = \langle N_{\mathbf{k}} \rangle , \quad (20)$$

und schreiben (18) als

$$\frac{U_0}{V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}^{\mathbf{k}_1 \neq \mathbf{k}_2} n_B(\epsilon_{\mathbf{k}_1}) n_B(\epsilon_{\mathbf{k}_2}) . \quad (21)$$

- Fall $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_2$: Beide Vernichter wirken auf den gleichen Zustand. Der Beitrag zum Matrixelement $\langle \alpha | \hat{U} | \alpha \rangle$ ist

$$\begin{aligned} & \frac{U_0}{2V} \sum_{\mathbf{k}_1} \langle \dots, N_{\mathbf{k}_1}, \dots | \hat{a}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_1} \hat{a}_{\mathbf{k}_1} | \dots, N_{\mathbf{k}_1}, \dots \rangle \\ &= \frac{U_0}{2V} \sum_{\mathbf{k}_1} \langle \dots, N_{\mathbf{k}_1}, \dots | \hat{a}_{\mathbf{k}_1}^\dagger (\hat{a}_{\mathbf{k}_1} \hat{a}_{\mathbf{k}_1}^\dagger - 1) \hat{a}_{\mathbf{k}_1} | \dots, N_{\mathbf{k}_1}, \dots \rangle \\ &= \frac{U_0}{2V} \sum_{\mathbf{k}_1} (N_{\mathbf{k}_1}^2 - N_{\mathbf{k}_1}) \quad (22) \end{aligned}$$

Für den Beitrag zu $\delta\Omega$ setzen wir wieder in (14) ein und verwenden die oben ausführlich diskutierte Schreibweise mit dem Mittelwert und der Bose-Funktion

$$\frac{U_0}{2V} \sum_{\mathbf{k}_1} (\langle N_{\mathbf{k}_1}^2 \rangle - \langle N_{\mathbf{k}_1} \rangle) = \frac{U_0}{2V} \sum_{\mathbf{k}_1} (\langle N_{\mathbf{k}_1}^2 \rangle - n_B(\epsilon_{\mathbf{k}_1})) . \quad (23)$$

Wir benutzen jetzt, dass für das Bosegas

$$\langle N_{\mathbf{k}_1}^2 \rangle = 2\langle N_{\mathbf{k}_1} \rangle^2 + \langle N_{\mathbf{k}_1} \rangle = 2n_B(\epsilon_{\mathbf{k}_1})^2 + n_B(\epsilon_{\mathbf{k}_1}) \quad (24)$$

gilt, was man mit $Z_{\mathbf{k}} = (1 - e^{-\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)})^{-1}$, $n_B(\epsilon_{\mathbf{k}})$ und der Definition des Mittelwerts (20) leicht überprüfen kann. Dann kürzt sich der zweite Term und wir erhalten

$$\frac{U_0}{V} \sum_{\mathbf{k}_1} (n_B(\epsilon_{\mathbf{k}_1}))^2 . \quad (25)$$

Für die Korrektur zum großkanonischen Potential summieren wir (21) und (25) und finden

$$\delta\Omega = \frac{U_0}{V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}^{\mathbf{k}_1 \neq \mathbf{k}_2} n_B(\epsilon_{\mathbf{k}_1}) n_B(\epsilon_{\mathbf{k}_2}) + \frac{U_0}{V} \sum_{\mathbf{k}_1} (n_B(\epsilon_{\mathbf{k}_1}))^2 = \frac{U_0 N^2}{V} . \quad (26)$$

Man beachte, dass per Definition U_0 die Dimension Energie*Volumen hat.

Physikalisch ist es hier wichtig, dass die Wechselwirkung abstoßend ist, $U_0 > 0$. Das großkanonische Potential ist im Gleichgewicht minimal, d.h., falls $U_0 < 0$, wäre $\delta\Omega < 0$ und das System wäre instabil gegenüber der Störung. Das wiederum würde bedeuten, dass die Störungsentwicklung nicht sinnvoll ist und man stattdessen das neue minimierte großkanonische Potential finden müsste.