5.4 Bose-Einstein-Kondensat

[Nobel-Preis 2001 Cornell-Ketterle-Wieman]

Hintergrund: Großkanonische Zustandssumme:

$$Z(T,V,\mu) = Sp\left[e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}\right] = e^{-\beta\Omega(T,V,\mu)} \underset{\text{im thermodynamischen Limes}}{=} e^{-\beta V f(T,\mu)};$$

μ = chemisches Potential;

Ω = großkanonisches Potential;

f = (großkanonische) freie Energiedichte.

Teilchendichte:

$$n(T,\mu) := \frac{\langle\hat{N}\rangle}{V} = \frac{1}{\beta V}\frac{\partial_\mu Z}{Z} = -\frac{1}{V}\partial_\mu\Omega = -\partial_\mu f(T,\mu).$$

Für <u>freie</u> Teilchen: Seite 70: im Impulsraum geht es um abgekoppelten harmonischen Oszillatoren mit Energien $E_{\vec{k}} = \underbrace{\hbar\omega_{\vec{k}}}_{=:\varepsilon_{\vec{k}}}(n_{\vec{k}}+\frac{1}{2})$.

$$\Rightarrow Z = \prod_{\vec{k}}\sum_{n_{\vec{k}}=0}^{\infty} e^{-\beta(\varepsilon_{\vec{k}}-\mu)n_{\vec{k}} - \beta\varepsilon_{\vec{k}}\cdot\frac{1}{2}}$$

$$= \prod_{\vec{k}} e^{-\beta\varepsilon_{\vec{k}}\cdot\frac{1}{2}}\frac{1}{1-e^{-\beta(\varepsilon_{\vec{k}}-\mu)}} = \prod_{\vec{k}} e^{-\beta\left\{\frac{\varepsilon_{\vec{k}}}{2}+\frac{1}{\beta}\ln\left[1-e^{-\beta(\varepsilon_{\vec{k}}-\mu)}\right]\right\}}$$

$$\Rightarrow f = \frac{1}{V}\sum_{\vec{k}}\left\{\frac{\varepsilon_{\vec{k}}}{2}+\frac{1}{\beta}\ln\left[1-e^{-\beta(\varepsilon_{\vec{k}}-\mu)}\right]\right\}$$

$$\Rightarrow n = -\partial_\mu f = \frac{1}{V}\sum_{\vec{k}}\frac{e^{-\beta(\varepsilon_{\vec{k}}-\mu)}}{1-e^{-\beta(\varepsilon_{\vec{k}}-\mu)}} = \int\frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\,\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{\vec{k}}-\mu)}-1}$$

$\boxed{\text{Seite 69}: \frac{1}{V}\sum_{\vec{k}} \to \int\frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \text{ für } V\to\infty}$

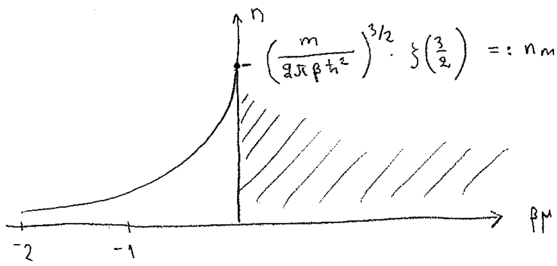
Sei jetzt $\varepsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}$.

$$\Rightarrow n = \frac{1}{(2\pi)^3}\cdot 4\pi\cdot\int_0^\infty dk\,k^2\,\frac{1}{e^{\beta(\frac{\hbar^2k^2}{2m}-\mu)}-1}; \qquad x := \frac{\beta\hbar^2k^2}{2m};\ k = \left(\frac{2mx}{\beta\hbar^2}\right)^{1/2}, \quad dx = \frac{\beta\hbar^2 k}{m}dk$$

$$= \frac{1}{2\pi^2}\cdot\left(\frac{m}{\beta\hbar^2}\right)^{3/2}\cdot\sqrt{2}\cdot\int_0^\infty\frac{dx\,x^{1/2}}{e^{x-\beta\mu}-1}.$$

Für $\beta\mu > 0$ ist das Integral nicht definiert (Pol bei $x=\beta\mu$) bzw. ergibt ein komplexes Ergebnis. Für $\beta\mu<0$ keine Probleme.

Grenzwert bei $\beta\mu\to 0^-$: $\int_0^\infty\frac{dx\,x^{1/2}}{e^x-1} = \frac{\sqrt{\pi}}{2}\underbrace{\zeta(\tfrac{3}{2})}_{\text{„Riemann-Zeta"}}$



Was wenn wir trotzdem mehr als $N_{max} := n_{max}\cdot V$ Teilchen ins System erzwingen? Bose & Einstein 1924: „eine makroskopische Besetzung des Grundzustands $\vec{k}=\vec{0}$". Was soll dies bedeuten?

<u>Erster Erklärungsversuch:</u> Seite 74 bzw. Aufgabe 11.3 : $\hat{H}$ <u>mit Wechselwirkungen</u>!

$$\hat{H} = \int_V d^3\vec{x} \left\{ \hat{\phi}^+(\vec{x}) \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\vec{x}) \right] \hat{\phi}(\vec{x}) + \hat{\phi}^+(\vec{x})\hat{\phi}^+(\vec{x}) \cdot \lambda \cdot \hat{\phi}(\vec{x})\hat{\phi}(\vec{x}) \right\},$$

externe „Falle"; wichtig in Experimenten aber hier $V \to 0$.

$\lambda := \frac{2\pi\hbar^2 a}{m}$ parametrisiert eine Zweiteilchenwechselwirkung.

$$\hat{N} = \int_V d^3\vec{x} \left\{ \hat{\phi}^+(\vec{x})\hat{\phi}(\vec{x}) \right\}.$$

Im Prinzip könnten diese (nach Übergang zum Impulsraum) als Ausgangspunkt dienen, die Behandlung (mittels „Bogoliubov-Transformation") ist aber relativ undurchschaubar (vgl. Schwabl 3.2.2).

<u>Übersichtliche Behandlung:</u> Pfadintegralquantisierung und Sattelpunktnäherung!

<u>Pfadintegral für Quantenfelder (Skizze):</u>

$$[\hat{\phi}(\vec{x}), \hat{\phi}(\vec{y})] = [\hat{\phi}^+(\vec{x}), \hat{\phi}^+(\vec{y})] = 0, \quad [\hat{\phi}(\vec{x}), \hat{\phi}^+(\vec{y})] = \delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{y}) \; ; \quad \hat{H} - \mu\hat{N} =: \int_V d^3\vec{x}\; \mathcal{H}(\hat{\phi}^+(\vec{x}), \hat{\phi}(\vec{x})).$$

Aufgabe 11.1

Der Einfachheit halber gehen wir „lokal" um; $\int_V d^3\vec{x}$ kann später hinzugefügt werden. Dann sieht das System wie ein harmonischer Oszillator aus:

$$[\hat{a}, \hat{a}] = [\hat{a}^+, \hat{a}^+] = 0, \quad [\hat{a}, \hat{a}^+] = 1 \quad ; \quad \hat{H} - \mu\hat{N} =: \mathcal{H}(\hat{a}^+, \hat{a}).$$

Potenzreihe; alle $\hat{a}^+$'s links!

(i) Eigenzustände :

$$|\alpha\rangle := e^{\alpha\hat{a}^+}|0\rangle, \qquad \alpha \in \mathbb{C}$$
$$= \left(1 + \alpha\hat{a}^+ + \ldots + \frac{1}{n!}\alpha^n(\hat{a}^+)^n + \ldots\right)|0\rangle$$
$$= |0\rangle + \alpha|1\rangle + \ldots + \frac{1}{\sqrt{n!}}\alpha^n|n\rangle + \ldots$$
$$\hat{a}|\alpha\rangle = 0 + \alpha|0\rangle + \ldots + \frac{1}{\sqrt{(n-1)!}}\alpha^n|n-1\rangle + \ldots \overset{!}{=} \alpha|\alpha\rangle$$
$$\Rightarrow \langle\alpha|\hat{a}^+ = \langle\alpha|\alpha^*$$

(ii) Übergangsamplitude:

$$\langle\alpha|\beta\rangle = \left(\langle 0| + \langle 1|\alpha^* + \ldots + \langle n|\frac{(\alpha^*)^n}{\sqrt{n!}} + \ldots\right)\left(|0\rangle + \beta|1\rangle + \ldots + \frac{\beta^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle + \ldots\right)$$
$$= 1 + \alpha^*\beta + \ldots + \frac{(\alpha^*\beta)^n}{n!} + \ldots = e^{\alpha^*\beta}.$$

(iii) Spur in α-Basis:

$$\mathrm{Sp}[\hat{A}] = \int \frac{d\alpha\, d\alpha^*}{\mathrm{const}}\, e^{-\alpha^*\alpha} \langle\alpha|\hat{A}|\alpha\rangle \quad !$$

Beweis:

$$\int d\alpha\, d\alpha^*\, e^{-\alpha^*\alpha + \alpha^* j + j^*\alpha} \underset{\alpha \to \alpha + j\, ;\; \alpha^* \to \alpha^* + j^*}{=} \int d\alpha\, d\alpha^*\, e^{-\alpha^*\alpha - \cancel{j^*\alpha} - \cancel{\alpha^* j} - j^* j + \cancel{\alpha^* j} + j^* j + \cancel{j^*\alpha} + j^* j}$$
$$= \int d\alpha\, d\alpha^*\, e^{-\alpha^*\alpha + j^* j}$$

$$\Rightarrow \frac{\int d\alpha\, d\alpha^*\, \overbrace{\alpha\alpha\ldots}^{m}\, \overbrace{\alpha^*\alpha^*\alpha^*\ldots}^{n}\, e^{-\alpha^*\alpha}}{\int d\alpha\, d\alpha^*\, e^{-\alpha^*\alpha}} = \frac{d^m}{d(j^*)^m}\frac{d^n}{dj^n}\, e^{j^* j}\Big|_{j = j^* = 0} \quad \text{(Wick-Theorem)}$$

$$\Rightarrow \int \frac{d\alpha\, d\alpha^*}{\mathrm{const}}\, e^{-\alpha^*\alpha}|\alpha\rangle\langle\alpha| = \int \frac{d\alpha\, d\alpha^*}{\mathrm{const}} \left(\ldots \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle \ldots\right)\left(\ldots \frac{(\alpha^*)^{n'}}{\sqrt{n'!}}\langle n'| \ldots\right)$$

Wick: $n = n'$ & $\underbrace{\overbrace{\alpha\alpha\ldots\;\alpha^*\alpha^*}^{n-1}\alpha^*\ldots}_{n} = n!$

$$= |0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1| + \ldots + |n\rangle\langle n| + \ldots = \hat{\mathbb{1}}$$

$$\Rightarrow \mathrm{Sp}[\hat{A}] = \mathrm{Sp}[\hat{\mathbb{1}}\hat{A}] \Rightarrow \blacksquare.$$

(iv) Pfadintegral:

$$\mathcal{Z} = S_p\left[e^{-\beta\mathcal{H}(\hat a^+,\hat a)}\right]$$

$$= \int \frac{d\alpha_1 d\alpha_1^*}{\text{Const}}\, e^{-\alpha_1^*\alpha_1} \langle\alpha_1| \overbrace{e^{-\frac{\varepsilon\mathcal{H}}{\hbar}} \cdots e^{-\frac{\varepsilon\mathcal{H}}{\hbar}}}^{n\ \text{Stück}} |\alpha_1\rangle \qquad \Big|\ \varepsilon = \frac{\beta\hbar}{n}$$

$$\hat{\mathbb{1}} = \int \frac{d\alpha_n d\alpha_n^*}{\text{const}} e^{-\alpha_n^*\alpha_n} |\alpha_n\rangle\langle\alpha_n| \qquad \hat{\mathbb{1}} = \int \frac{d\alpha_2 d\alpha_2^*}{\text{Const}}\, e^{-\alpha_2^*\alpha_2}\, |\alpha_2\rangle\langle\alpha_2|$$

Jedes Mal: $\quad e^{-\alpha_{j+1}^*\alpha_{j+1}} \langle\alpha_{j+1}| e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar}\mathcal{H}(\hat a^+,\hat a)} |\alpha_j\rangle$

$$= e^{-\alpha_{j+1}^*\alpha_{j+1}} \langle\alpha_{j+1}| e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar}\mathcal{H}(\alpha_{j+1}^*,\alpha_j) + O(\varepsilon^2)} |\alpha_j\rangle$$

$$= e^{-\alpha_{j+1}^*[\alpha_{j+1}-\alpha_j] - \frac{\varepsilon}{\hbar}\mathcal{H}(\alpha_{j+1}^*,\alpha_j) + O(\varepsilon^2)}$$

$$= e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar}\left\{\hbar\,\alpha_{j+1}^* \frac{\alpha_{j+1}-\alpha_j}{\varepsilon} + \mathcal{H}(\alpha_{j+1}^*,\alpha_j) + O(\varepsilon)\right\}}.$$

(v) Kontinuumlimes & Rückkehr zu ursprünglichen Variablen:

$$\boxed{\mathcal{Z} = \int_{\substack{\phi(\vec x,\beta\hbar) = \phi(\vec x,0)\\ \phi^*(\vec x,\beta\hbar) = \phi^*(\vec x,0)}} \mathcal{D}\phi(\vec x,\tau)\,\mathcal{D}\phi^*(\vec x,\tau)\, \exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\int_0^{\beta\hbar} d\tau \int_V d^3\vec x \left[\phi^*\left(\hbar\partial_\tau - \mu - \frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + V(\vec x)\right)\phi + \lambda(\phi^*\phi)^2\right]\right\}}.$$

Vgl. mit Seiten 55, 74: $\quad \mathcal{L}_E = -\mathcal{L}_M\left(i\partial_t \to -\partial_\tau + \underbrace{\frac{\mu}{\hbar}}_{\text{neu!}}\right)!$

Variablentransformation und Kondensat:

Schreibe: $\quad \phi = \frac{1}{\sqrt2}\left(\bar\phi + \underbrace{\phi_1 + i\phi_2}_{\phi'\in\mathbb{C}}\right) \quad ; \quad \bar\phi :=$ „Kondensat" := unabhängig von $\vec x,\tau$.

Der Wert von $\frac{\bar\phi}{\sqrt2}$ sei der Mittelwert bzw. Fourier Nullmode von ϕ:

$$\frac{\bar\phi}{\sqrt2} := \frac{1}{\beta\hbar V}\int_0^{\beta\hbar} d\tau \int_V d^3\vec x\,\phi \quad\Rightarrow\quad \int_0^{\beta\hbar} d\tau\int_V d^3\vec x\,\phi'\,\underbrace{e^{i0\cdot\tau + i\vec 0\cdot\vec x}}_{1} \overset{!}{=} 0.$$

Es folgt: (setze $V(\vec x)\to 0$ hier)

$$* \quad \left(\hbar\partial_\tau - \mu - \frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}\right)\phi = -\frac{\mu}{\sqrt2}\bar\phi + \left(\hbar\partial_\tau - \mu - \frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}\right)\frac{\phi'}{\sqrt2}$$

$$\Rightarrow \int_0^{\beta\hbar} d\tau\int_V d^3\vec x\,\phi^*\left(\hbar\partial_\tau - \mu - \frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}\right)\phi = \beta\hbar V\left(-\frac{\mu}{2}|\bar\phi|^2\right) + \int_0^{\beta\hbar} d\tau\int_V d^3\vec x\,\frac12\phi'^*\left(\hbar\partial_\tau - \mu - \frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}\right)\phi'$$

$$* \quad \phi^*\phi = \frac12\left(\bar\phi^* + \phi_1 - i\phi_2\right)\left(\bar\phi + \phi_1 + i\phi_2\right) = \frac12\left(\bar\phi^2 + 2\bar\phi\phi_1 + \phi_1^2 + \phi_2^2\right)$$

wähle $\bar\phi\in\mathbb{R}^+$ durch eine „globale" Phasentransformation („spontane Symmetriebrechung"; man könnte dies besser tun.)

$$\Rightarrow \int_0^{\beta\hbar} d\tau\int_V d^3\vec x\,\lambda(\phi^*\phi)^2 = \frac{\lambda}{4}\int_0^{\beta\hbar} d\tau\int_V d^3\vec x\,\Big\{\bar\phi^4 + 4\bar\phi^2\phi_1^2 + (\phi_1^2+\phi_2^2)^2 + \underbrace{4\bar\phi^3\phi_1}_{\text{linear in } \phi' \Rightarrow \text{Integral verschwindet!}} + 2\bar\phi^2(\phi_1^2+\phi_2^2) + 4\bar\phi\phi_1(\phi_1^2+\phi_2^2)\Big\}$$

Insgesamt: $\quad \frac{1}{\hbar}\int_0^{\beta\hbar} d\tau\int_V d^3\vec x\,[\ldots] = \beta V\left\{-\frac{\mu}{2}\bar\phi^2 + \frac{\lambda}{4}\bar\phi^4\right\}$

$$+ \frac{1}{\hbar}\int_0^{\beta\hbar} d\tau\int_V d^3\vec x\,\Big\{\frac12\phi_1\left[\hbar\partial_\tau - \mu - \frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + 3\lambda\bar\phi^2\right]\phi_1 + \frac12\phi_2\left[\hbar\partial_\tau - \mu - \frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + \lambda\bar\phi^2\right]\phi_2 + \lambda\bar\phi\phi_1(\phi_1^2+\phi_2^2) + \frac{\lambda}{4}(\phi_1^2+\phi_2^2)^2\Big\}.$$

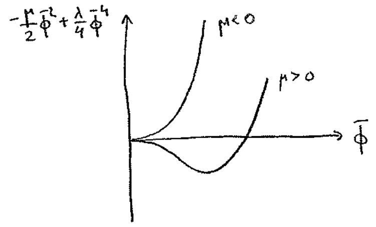
Sattelpunktnäherung: (vgl. Seite 59)

Das Pfadintegral lautet jetzt:

$$Z = \int_0^\infty d\bar{\phi}\; e^{-\beta V\left(-\frac{\mu}{2}\bar{\phi}^2 + \frac{\lambda}{4}\bar{\phi}^4\right)} \int_{R.b.} \mathcal{D}\phi' \mathcal{D}\phi'^* \; e^{-\frac{1}{\hbar}\int_0^{\beta\hbar} d\tau \int_V d^3\vec{x}\; \mathcal{L}_E(\bar{\phi};\phi_1,\phi_2)} .$$

Hier gehört eigentlich $2\pi\bar{\phi}$ wie in $d^2\vec{r} = 2\pi r dr$ aber dies spielt bei $\beta V \to \infty$ keine Rolle.

Man sollte hier zuerst über ϕ', ϕ'^* und nachher über $\bar{\phi}$ integrieren, aber der Punkt wird auch in der falschen Reihenfolge klar:



Sattelpunkt bei $\mu > 0$: $\frac{d}{d\bar{\phi}}\left(-\frac{\mu}{2}\bar{\phi}^2 + \frac{\lambda}{4}\bar{\phi}^4\right) = -\mu\bar{\phi} + \lambda\bar{\phi}^3 \overset{!}{=} 0 \Rightarrow \mu = \lambda\bar{\phi}^2$.

Beitrag des Kondensats zur freien Energiedichte: $f = -\frac{\mu^2}{2\lambda} + \frac{\mu^2}{4\lambda} = -\frac{\mu^2}{4\lambda}$.

Beitrag des Kondensats zur Teilchendichte: $n = -\partial_\mu f = \frac{\mu}{2\lambda}$.

Die Lagrange-Dichte der Fluktuationen:

$$\mathcal{L}_E(\bar{\phi};\phi_1,\phi_2) = \frac{1}{2}\phi_1\Big[\hbar\partial_\tau \underbrace{\underbrace{-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} - \mu}_{\text{früher: „}\varepsilon_{\vec{k}}-\mu\text{“}} + 3\mu}_{\text{jetzt: „}\varepsilon_{\vec{k}}+2\mu\text{“}\ \Rightarrow\ \text{Problem gelöst!}}\Big]\phi_1 + \frac{1}{2}\phi_2\Big[\hbar\partial_\tau \underbrace{\underbrace{-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} - \mu}_{\text{früher: „}\varepsilon_{\vec{k}}-\mu\text{“}} + \mu}_{\text{jetzt: „}\varepsilon_{\vec{k}}\text{“}\ \Rightarrow\ \text{Problem gelöst}}\Big]\phi_2 + \mathcal{O}(\phi_i^3) .$$

(Der zweite Modus (ϕ_2) enthält keine Abhängigkeit von μ, d.h. gibt keinen Beitrag zu n. Es gibt trotzdem wichtige Physik drin: ϕ_2 wird auch ein „Goldstone-Boson" genannt. Eine bessere Parametrisierung wäre vielleicht $\phi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\bar{\phi}+\phi_1)e^{i\frac{\phi_2}{\bar{\phi}}}$ gewesen.)

Endergebnis: (vgl. Seite 75)