

Statik und Dynamik ultrakalter Spinor-Quantengase

Diplomarbeit von
Benno Liebchen

Vorgelegt dem Fachbereich Physik der
Freien Universität Berlin



Erstgutachter: Prof. Dr. Jürgen Bosse

Berlin, den 30.03.2010

Kurzfassung

In dieser Diplomarbeit werden Eigenschaften der Gleichgewichtsthermodynamik und der Dynamik idealer Bosonen und Fermionen mit $2F + 1$ Spinfreiheitsgraden untersucht. Den Betrachtungsschwerpunkt bilden Spinor-Kondensate, deren Magnetisierung ein experimentell kontrollierbarer Parameter ist.

Es werden exakte numerische Resultate und analytische Näherungen des M - T -Phasendiagramms, der Kondensatdichte sowie der thermischen Besetzung der Zeeman-Zustände, des chemischen Potentials und der nichtlinearen inneren magnetischen Suszeptibilität homogener Spinor-Bosonen abgeleitet. Im Rahmen einer semiklassischen Näherung werden diese Ergebnisse auf Bosonen im harmonischen Potential erweitert. Das chemische Potential und die innere magnetische Suszeptibilität werden auch für Fermionen dargestellt und durch exakte analytische Ergebnisse am Temperaturnullpunkt ergänzt.

Mittels Korrelationsfunktionen wird die Dynamik untersucht. Es werden exakte Resultate der Teilchen- und Magnetisierungsdichte-Spektralfunktion sowie der longitudinalen und der transversalen Strom-Spektralfunktionen bei endlicher Temperatur abgeleitet. Daraus werden die entsprechenden statischen Suszeptibilitäten berechnet. Es folgen die superfluide Dichte, der dynamische und der statische Strukturfaktor. Diese Ergebnisse werden teilweise im Rahmen einer semiklassischen (LDA) Näherung auf Systeme im harmonischen Potential erweitert.

Abstract

In this diploma thesis properties of equilibrium thermodynamics and dynamics of ideal bosons and fermions with $2F + 1$ inner degrees of freedom are investigated. Special emphasis is given to Spinor-condensates, whose magnetization is an experimentally controllable parameter.

Exact numerical results and analytical approximations for the M - T -phase diagram, the condensate density, as well as for the thermal occupation of all zeeman states, the chemical potential and the nonlinear inner magnetic susceptibility are derived. Within a semi-classical approximation these results are extended to harmonically trapped bosons. The chemical potential and the inner magnetic susceptibility are also presented for fermions and supplemented with exact, analytical results at zero temperature.

Using correlation functions the dynamics is studied. Exact results of both, particle- and magnetic-density-spectral functions, as well as the corresponding current-spectral functions at finite temperatures are calculated. Herefrom, the corresponding static susceptibilities are derived. The superfluid density and the dynamic and the static structure factor are following. These results were partly extended to harmonically trapped systems within a semi-classical (LDA)-approximation.

Eigenständigkeitserklärung

Hiermit versichere ich, diese Diplomarbeit selbstständig und ohne unerlaubte Hilfe verfasst, sowie keine anderen Hilfsmittel und Quellen als die im Literaturverzeichnis angegebenen verwendet zu haben.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	9
1.1	Abriss der Historie	9
1.2	Ideale Quantengase	13
1.3	Bose-Einstein-Kondensation	14
1.4	Spinorkondensate	16
1.5	Strukturfaktor und Bragg-Spektroskopie	17
1.6	Aufbau der Arbeit	20
2	Theoretische Grundlagen	22
2.1	Teilchendichte und Teilchenstromdichte	22
2.2	Magnetisierung und Magnetisierungsstrom	25
2.3	Hamiltonoperator vom Einteilchentyp	26
2.3.1	Allgemeine Lösungen	26
2.3.2	Beispiele in Impuls-Spin-Darstellung	28
	Vorbemerkung zu Kapitel 3	30
3	Allgemeine Charakteristika idealer Spinor-Quantengase	31
3.1	Definition des Systems	32
3.1.1	Hamiltonoperator	32
3.1.2	Erhaltung der Magnetisierung	33
3.2	Gleichungssystem zur Thermodynamik	35
3.2.1	Identitäten für Teilchenzahl und Magnetisierung	35
3.2.2	Lösung der stationären Gross-Pitaevskii-Gleichungen	38
3.3	Charakteristische Größen	41
3.3.1	Kritische Temperaturen	41
3.3.2	Kondensatdichte	45
3.3.3	Chemisches und magnetochemisches Potential	52
3.3.4	Magnetische Suszeptibilität	56
4	Korrelationsfunktionen und Dynamik	60
4.1	Anregungsspektren	62
4.2	Dichte-Spektralfunktionen	63

4.2.1	Indexverschiebung	63
4.2.2	Berechnung der k-Summe	63
4.2.3	Magnetisierungs- und Teilchendichte-Spektralfunktion	65
4.2.4	Diskussion	67
4.3	Strom-Spektralfunktionen	70
4.3.1	Zerlegung in longitudinalen und transversalen Anteil	70
4.3.2	Berechnung der k-Summe	72
4.3.3	Longitudinale Strom-Spektralfunktionen	74
4.3.4	Transversale Strom-Spektralfunktionen	74
4.3.5	Diskussion	76
4.4	Statische Suszeptibilitäten	78
4.4.1	Longitudinal statische Teilchenstromsuszeptibilität	79
4.4.2	Statische Dichtesuszeptibilität und transversal statische Teilchenstromsuszeptibilität	80
4.4.3	Diskussion, Kompressibilität und Schallgeschwindigkeit	84
5	Anwendungen	86
5.1	Superfluidität	86
5.1.1	Grundlagen und Landau-Definition der superfluiden Dichte	87
5.1.2	Mikroskopische Definition der superfluiden Dichte	88
5.1.3	Vergleichende Diskussion	90
5.1.4	Superfluide Dichte idealer Spinorquantengase	91
5.1.5	Auswertung mittels der mikroskopischen Definition	91
5.1.6	Kontrolle des Ergebnisses mittels der Landau Definition	93
5.1.7	Josephson Relation zwischen superfluider Dichte und Kondensatdichte	94
5.2	Strukturfaktor	94
5.2.1	Dynamischer Strukturfaktor	95
5.2.2	Statischer Strukturfaktor	97
6	Fermionen	100
6.1	Thermodynamik	101
6.1.1	Chemisches und magnetochemisches Potential	101
6.1.2	Magnetische Suszeptibilität	103
6.1.3	Tieftemperaturgrenzfall	103
6.2	Spektralfunktionen	106
6.2.1	Dichte- und Strom-Spektralfunktionen	106
6.2.2	Tieftemperaturgrenzfall	108
7	Inhomogene Systeme	110
7.1	Statische Eigenschaften	110
7.1.1	Identitäten für Teilchenzahl und Magnetisierung	111
7.1.2	Gross-Pitaevskii-Gleichungen	113
7.1.3	Kritische Temperatur	114

7.1.4	Kondensatdichte	117
7.1.5	Chemisches und magnetochemisches Potential	121
7.2	Dynamische Eigenschaften	124
7.2.1	Dichte-Spektralfunktionen in LDA-Näherung	124
7.2.2	Teilchenstrom-Spektralfunktionen in LDA-Näherung	131
7.3	Fermionen	134
Zusammenfassung und Ausblick		138
A	Theoretische Grundlagen	141
A.1	Motivation der verwendeten Methode	141
A.2	Definitionen	142
A.3	Eigenschaften und Theoreme	143
A.3.1	Homogenität in der Zeit	143
A.3.2	Spektraldarstellung	144
A.3.3	Spektraltheorem	145
A.3.4	Bewegungsgleichung	146
A.4	Transformationsformeln	148
A.4.1	Retardierte und avancierte Green-Funktion aus Spektralfunktion	148
A.4.2	Spektralfunktion und Green-Funktionen	149
A.4.3	Kramers-Kronig-Relationen	150
B	Effektive Wirkung	153
B.1	Dirac-Imaginärzeitentwicklungsoperator	154
B.2	Großkanonische Zustandssumme	156
B.3	Effektive Wirkung	159
B.4	Gross-Pitaevskii-Gleichung	161
B.5	Matsubara-Funktion	163
C	Historische Ideenfolge zur Bose-Einstein-Kondensation	168
D	Paramagnetismus des Maxwell-Boltzmann-Gases	171
E	Identitäten, Definitionen, Integrale	174
E.1	Kommutatoridentitäten	174
E.2	Dirac-Identität	175
E.3	Integraldarstellung der Stufenfunktion	176
E.4	Polylogarithmus	177
E.5	Lösung einiger Integrale	177
F	Reduzierte Einheiten	180
F.1	Homogene Systeme	180
F.2	Inhomogene Systeme	180

Abbildungsverzeichnis	182
Literaturverzeichnis	185
Danksagung	191

Kapitel 1

Einleitung

Am Beginn steht ein Abriss der historischen Entwicklung der Bose-Einstein Kondensation (BEK). Dabei finden die Referenzen [1]–[8] kontextuale Verwendung. Anschließend werden die zentralen Begriffe dieser Arbeit mit Definitionen bedient und fundamentale Konzepte erläutert. Es folgt eine Darlegung der Bedeutung des Strukturfaktors in Zusammenhang mit BEKen und der Methode der Bragg-Spektroskopie. Die Einleitung schließt mit einer Inhaltsübersicht dieser Arbeit.

1.1 Abriss der Historie

Im Jahre 1995 gelang Anderson, Ensher et al. am Joint Institute for Laboratory Astrophysics in Boulder, Colorado die erste Erzeugung eines Bose-Einstein Kondensats (BEKs) in einem Gas aus ^{87}Rb Atomen [9]. Auf der gleichzeitig tagenden International Conference of Laserspectroscopy auf Capri war indessen die Atmosphäre von Gespanntheit ob dieses Experimentes gezeichnet.

Woher rührte diese Erwartung?

Die Erzeugung eines BEKs bestätigte einerseits die theoretische Vorhersage von 1925 (s.u.) und eröffnete andererseits ein Feld der Physik, zur Erforschung dieses neuen Zustands von Materie. Was ist die Besonderheit eines BEKs? BEKe sind kohärent. Was der Laser für die immateriellen Photonen verwirklicht, gelingt im BEK für Atome: Eine makroskopische Atomzahl ist im selben Quantenzustand. Sie werden alle durch dieselbe Wellenfunktion beschrieben, häufen sich bei Geschwindigkeit null und folgen alle derselben Dynamik. Wie Photonen im Laser ist ihre Phasenbeziehung konstant und die Interferenz rein konstruktiv.

Wie kam es dazu?

Um die Wende zum 19. Jahrhundert baute H.K. Onnes an der Universität Leiden in den Niederlanden Kältemaschinen mit dem Ziel, alle chemischen Elemente in den flüssigen und festen Aggregatzustand zu überführen, vor allem um deren Existenz nachzuweisen. Größte Schwierigkeit bereitete dabei die Kondensation von Helium. 1894 konnte er Temperaturen von etwa 90K erzeugen und ein Kältebad aus Flüssigsauerstoff herstellen. 1908 gelang die Verflüssigung von Helium, dessen Schmelzpunkt bei 4,11K liegt. Allein des festen Aggregatzustandes verwehrte sich Helium. 1911 beobachtete Onnes, dass der elektrische Widerstand von Quecksilber unterhalb von etwa 4,1K plötzlich unter die Grenze der Messbarkeit springt. Dies war die Entdeckung der Supraleitung. Im selben Jahr kroch in seinem Labor ein dünner Helium-Film an den Gefäßwänden des Kühlbehältnisses aufwärts, der Schwerkraft entgegen. Es war die Entdeckung des „Onnes-Effektes“ als wesentlicher Eigenschaft der Superfluidität.

Die Quantentheorie steckte damals noch in den Kinderschuhen und die Phänomene vollkommen verlustfreien Stromflusses und der widerstandsfreien Bewegung einer Flüssigkeit waren ein Rätsel. Onnes Schüler W. Keesom, dem 1926 durch Verwendung eines Druckes von über 25 bar schließlich die Verfestigung des Heliums gelang, drückt das Erstaunen seiner Zeit aus: „...dass sich die Wärmeleitfähigkeit beim Übergang von He I in He II auf das Dreimillionenfache vergrößert...“[1] Wie wir heute wissen, liegt beiden Phänomenen eine BEK zugrunde.

Die Existenz von Bose-Einstein-Kondensaten wurde bereits 1924/25 von S. Bose [10] und A. Einstein [11, 12] theoretisch begründet. Bose fand eine statistische Ableitung des Planckschen Strahlungsgesetzes für Photonen, die unabhängig von der klassischen Elektrodynamik ist. Anstatt wie Planck die mögliche Anzahl stehender Wellen in einem Hohlraum gegebenen Volumens abzuzählen, berechnete er die Anzahl der Zellen des Einteilchenphasenraums. Einstein registrierte, dass die Ableitung des Planck-Gesetzes für Wellen wie auch für Teilchen gelungen war. Er griff als erster De Broglies neue Idee der Materiewellen auf und verallgemeinerte Boses Berechnungen auf massive Teilchen. In der zweiten Arbeit [12] ist dabei erstmals von der Kondensation die Rede: „...etwas ähnliches Eintritt wie beim isothermen Komprimieren eines Dampfes über das Sättigungsvolumen. Es tritt eine Scheidung ein; ein Teil kondensiert, der Rest bleibt ein gesättigtes ideales Gas.“ (Überschreitet die Dampfkonzentration einen kritischen Wert, setzt Kondensation ein - wodurch das System weiterem Druckanstieg ausweicht.)

Bis 1928 galt die BEK als Theorie von rein imaginärem Charakter. F. London schlug 1938 vor, die (bereits in Vergessenheit geratene) Theorie zur Erklärung des 1928 von W. Keesom verwendeten Phasenübergangs von He I zu superfluidem He II als BEK aufzufassen [13]. Einen Meilenstein legte auch Beliaev 1958, als er am Beispiel der BEK das Konzept des Ordnungsparameters zur Beschreibung von Phasenübergängen einführte [14].

So gewann die BEK Bedeutung in der Theorie der kondensierten Materie und die erste experimentelle Begegnung geschah mit Helium. Was ist die Besonderheit des Heliums?

Selbst unter den Edelgasen ist Helium ein Sonderling. Die voll gefüllte s-Schale und die Kleinheit des Atoms führt zu einmaliger Symmetrie und Stabilität. Es ist das einzige Element, das bei Normaldruck bei keiner Temperatur flüssig wird. Schon der Bildung einzelner Moleküle widersetzt es sich, energetisch begründet, noch bei sehr tiefer Temperatur. Dann jedoch, wird die thermische De Broglie-Wellenlänge groß im Verhältnis zur mittleren freien Weglänge $\frac{\lambda_T}{\lambda_{\text{frei}}} \propto \frac{n^{\frac{1}{3}}}{\sqrt{T}}$ und die Interferenz der Wellenfunktionen wird relevant. Dieser quantenmechanische Effekt der Interferenz der Atome selbst führt dazu, dass sie nicht länger individuell beschrieben werden können. Vielmehr bilden sie in Folge der Heisenbergschen Unschärferelation ein System prinzipiell ununterscheidbarer Teilchen. Der Begriff der Trajektorie verliert seinen Sinn. Anstatt des Zustands der einzelnen Atome ist nur noch der Zustand des Systems sinnvoll erklärt. Die Atome verlieren ihre Identität im Kollektiv.¹ Diese Situation in kaltem Helium ist aus klassischer Perspektive eine Absurdität. Wir können uns nur vorstellen, was wir aus unseren sinnlichen Erfahrungen, den Quellen der Bilder unseres Vorstellungsvermögens, konstruieren bzw. kombinieren können. Das Verhalten eines solchen Systems identischer Teilchen ist deshalb prinzipiell nicht anschaulich.

Bei hoher Temperatur ist die thermische De Broglie-Wellenlänge hinreichend klein und die Teilchen in guter Näherung als unterscheidbar behandeln zu können. Dann verhalten sie sich der klassischen Mechanik und unserer Vorstellung treu. Helium jedoch widersetzt sich bei tiefen Temperaturen der Kondensation und die Ununterscheidbarkeit der Atome wird relevant. Die Quantenmechanik übertritt dann die Schwelle des Mikrokosmos, um auf der Skala des Makrokosmos sinnlich erfahrbar zu werden. Superfluidität, Supraleitung, Quanten-Hall-Effekt, Laser und BEK sind Beispiele makroskopischer Quantenphänomene.

Es ist erstaunlich, dass es trotzdem gelungen ist, quantitative Vorhersagen zu treffen und darüber Verfahren zu entwickeln, mit denen die Konsequenzen erfassbar wurden. Für L.D. Landau war es der Triumph des menschlichen Geistes, verstehen zu können, was nicht einmal vorstellbar ist. [1]

Allein in Helium ist nicht mehr als 8% Kondensatdichte möglich. Es blieb der Vorgesmack der wirkte und den Wunsch nach reinen BEKen evozierte. Dies gelang erst 1995 Anderson Ensher et al. [9], durch Verwendung einer Kombination aus Laserkühlung und evaporativer Kühlung von ⁸⁷Rb Atomen am JILA in Boulder/Colorado. Im selben Jahr erfolgte die Realisierung mit ²³Na Atomen durch Davis, Mewes et al. am MIT in Cambridge/Massachusetts [15]. Warum dauerte es so lange?

Der Grund für die geringe Kondensatdichte in Helium ist die rein quantenstatistische Natur der BEK. Im stark wechselwirkenden Helium erfährt, wie in Abschnitt 1.3 dargestellt, die Ursache der Kondensation durch die Zweiteilchenwechselwirkung partielle Kompensation. Um eine einträgliche Kondensatdichte zu erzielen, müssen deshalb anstatt von

¹Deshalb ist die Identifikation bestimmter Atome mit der Eigenschaft der BEK eine Unsitte. Die Kondensatdichte ist wie die Superfluidität Eigenschaft des Systems als Ganzem.

flüssigem Helium, schwach wechselwirkende atomare Gase verwendet werden.

Für jene ist, wie Abbildung 1.1 zeigt, bei den erforderlichen Temperaturen allein die feste Phase stabil. BEK kann in solchen Gasen deshalb höchstens als metastabiler Zustand auftreten. Dies wiederum macht die kinetische Hemmung der Molekülbildung erforderlich. Dem ist nur durch Verwendung stark verdünnter Gase nachzukommen, sowie der Isolation von jedweder materiellen Umgebung durch die Verwendung magnetischer oder optischer Fallenpotentiale. Gilt $\lambda_{\text{frei}} = \left(\frac{V}{N}\right)^{\frac{1}{3}}$, dann ist

$$\frac{\lambda_T}{\lambda_{\text{frei}}} \propto \frac{n^{\frac{1}{3}}}{\sqrt{T}} \quad (1.1)$$

mit der Proportionalitätskonstanten $\sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B}}$. Bei T_c ist das Verhältnis $\frac{\lambda_T}{\lambda_{\text{frei}}} \approx 0.777(2s+1)^{\frac{1}{3}}$, also von der Größenordnung 1. Bei geringer Dichte wird λ_{frei} jedoch sehr groß und es sind ultratiefe Temperaturen in der Größenordnung von 10^{-6} K nötig, damit die Wellenfunktionen trotzdem in derart relevantem Maße interferieren, dass Kondensation eintritt.

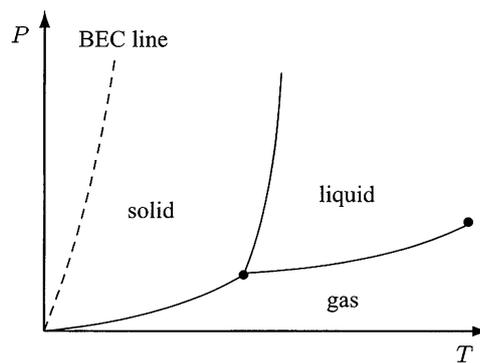


Abbildung 1.1: Typisches p-T-Phasendiagramm: Die BEK-Linie liegt in der festen Phase eines Systems im thermodynamischen Gleichgewicht. Ein BEK kann deshalb in atomaren Gasen nur als metastabiler Zustand existieren [2].

Heute sind die erforderlichen Kühltechniken wohl etabliert und der kälteste Punkt des Universums wandert um den Erdball. BEKe aus verdünnten Alkali- und Erdalkalimetallen sowie aus Wasserstoff und Chrom werden regelmäßig in zahlreichen Labors der Welt als Experimentiergut hergestellt.

Als der erste Rubinlaser 1960 durch T. Maiman erfunden wurde, ahnte zuerst niemand dessen gewaltigen Feldzug durch Haushalte, Krankenhäuser, Zahnarztpraxen, Industrie und Wissenschaft. Heute erscheint ein Leben ohne Laser antiquiert. Die stimulierte Emission erfolgt für ununterscheidbare Atome entsprechend denselben Gesetzmäßigkeiten wie für Licht. Der Atomlaser auf Basis von BEKen wurde zuerst 1997 von M.O. Mewes et

al. entwickelt [16]. Eine stabile Version erscheint greifbar. Auch als Informationsspeicher künftiger Quantencomputer, wie zur Präzession von Atomuhren und Messinstrumenten kommen BEKe in Betracht. In jüngerer Zeit sind Ideen zur Simulation der inflationären Phase des Universums mithilfe von BEKen entstanden [17] und es werden Zusammenhänge zwischen galaktischen BEKen und dunkler Materie diskutiert [18]. Ein Blick auf die rasche Entwicklung seit 1995 lässt die Möglichkeiten ihres künftigen Wirkungsfeldes erahnen:

Stamper-Kurn et al. gelang 1998 am MIT die erste Realisierung eines BEKes mit inneren Freiheitsgraden [19] als ein im Vergleich zu Festkörpern gut kontrollierbares magnetisches System. Damit ist die Verbindung der fruchtbaren und sehr aktiven Gebiete des Magnetismus und der BEK gelungen.

Mittels Feshbach-Resonanzen kann die Wechselwirkung zwischen Atomen kontrolliert werden. Damit gelang 2003 S. Jochim et al. in Innsbruck [20] die Erzeugung einer attraktiven Wechselwirkung zwischen Fermionen, die gemäß der theoretischen Erwartung [21] zur BEK in einem Fermionensystem führte. Dies ermöglicht kontrollierbare Untersuchungen der in Festkörpern unzugänglichen Supraleitung.

Im Zuge einer Reihe von Vorschlägen durch D. Jaksch und P. Zoller konnte kürzlich ebendort durch J.G. Danzl et al. das erste BEK aus chemisch stark gebundenen $^3\text{Li}_2$ Molekülen [22] erzeugt werden.

Die Wurzeln der BEK reichen bis tief an die Quellen der modernen Physik. Es bleibt abzuwarten, ob der BEK eine Ära wie dem Laser blüht und welche Rolle Atomlaser und BEK-Speichermedien in ferner Zukunft spielen.

1.2 Ideale Quantengase

Ein Quantengas ist ein System prinzipiell ununterscheidbarer Teilchen, dessen Phänomenologie sowohl durch die Quantenmechanik als auch durch die Quantenstatistik bestimmt ist. Im Unterschied zu einer Quantenflüssigkeit wie Helium ist der Energiebeitrag der Zwei- (und Mehr)teilchenwechselwirkung im Quantengas klein.

Ein ideales Gas ist ein System aus Punktteilchen, dessen Hamilton-Funktion keinen Wechselwirkungsterm enthält. Für freie klassische ideale Gase werden die Termini „wechselwirkungsfrei“ und „ideal“ sinnvoll äquivalent gebraucht. Für ideale Quantengase ist diese Gleichsetzung nicht sinnvoll. Sie folgen einer anderen Statistik. Die Wahrscheinlichkeit, sich in einem bestimmten Impuls- bzw. Energiezustand zu befinden, ist davon abhängig, ob sich dort bereits ein anderes Teilchen befindet. Dies lässt sich als implizite, auf der kollektiven Identität der Teilchen beruhende Wechselwirkung verstehen, die natürlich

von deren Ununterscheidbarkeit herrührt. Die effektive Anziehung zwischen Bosonen ist deshalb unmittelbare Konsequenz der bezüglich Vertauschung zweier Teilchen symmetrischen Wellenfunktion und ebenso resultiert die effektive Abstoßung zwischen Fermionen aus deren antisymmetrischer Wellenfunktion.

Für hohe Temperaturen konvergieren sowohl die Fermi-Dirac- als auch die Bose-Einstein-Statistik gegen die klassische Boltzmann-Statistik. Quantenstatistische Effekte dürfen also in idealen Quantengasen nur bei niedrigen Temperaturen erwartet werden. Dies wird auch dadurch illustriert, dass die thermische De Broglie-Wellenlänge mit steigender Temperatur kleiner wird. Für hohe Temperaturen interferieren die Wellenfunktionen in nur geringem Maße, und die Teilchen können in guter Näherung als unterscheidbar begriffen werden. Die mit der Fermi-Dirac-Statistik verbundene effektive Abstoßung wird einfach aus dem Pauli-Prinzip verständlich, dem zufolge die zeitgleiche Besetzung ein und desselben Quantenzustands durch zwei identische Fermionen ausgeschlossen ist. Deshalb wird auch von Pauli-Abstoßung gesprochen.

Bosonen ist dagegen eine effektive Anziehung zu eigen, die die Besetzung eines Quantenzustandes desto wahrscheinlicher macht, je mehr Bosonen sich dort bereits befinden. Dies manifestiert sich für tiefe Temperaturen besonders eindrucksvoll in Form der BEK. Inzwischen hat sich die Manipulation der s-Wellen Streulänge durch Ausnutzung von Feshbach-Resonanzen zu einer häufig verwendeten Technik entwickelt. Waren Systeme idealer Fermionen und Bosonen schon immer Ausgangspunkt zum Verständnis wechselwirkender Systeme und ferner von prinzipiellem Belang, so ist es heute, dieser Entwicklung zum Danke, möglich geworden solche Systeme sogar im Bereich ultrakalter Temperaturen zu erzeugen.

1.3 Bose-Einstein-Kondensation

BEK bezeichnet die makroskopische Besetzung eines Quantenzustandes. Dabei ändert sich die Ordnung des Systems. Das Phänomen wird der Klasse der kritischen Phänomene zugeordnet. Es ist bemerkenswert, dass die BEK nicht auf Zwei- oder Mehrteilchenwechselwirkungen beruht, sondern in idealen Bosonengasen auftritt. An dieser Stelle erfolgt die Begründung des Phänomens ausgehend von der Bose-Einstein-Verteilungsfunktion um unmittelbare Einsicht in die rein quantenstatistische Natur des Phänomens zu erzielen. Die historische Ideenfolge zur Begründung derselben, gleichwie der BEK wird in Abschnitt C dargestellt, macht sie doch auf Gewohnheit und Voreingenommenheit aufmerksam, welche dem Ansatz der üblichen Ableitung der Bose-Einstein Verteilungsfunktion durch Maximierung des Unbestimmtheitsmaßes unter Nebenbedingungen zugrunde liegt. Sie zeigt darüber die Qualität des Einflusses auf die Entwicklung der Quantenmechanik in den Jahren 1926/27.

Die Bose-Einstein-Verteilungsfunktion beschreibt die mittlere Besetzungszahl eines Einteilchenzustands $|\mathbf{k}\sigma\rangle$ mit Energie $\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}$ für ein ideales Bose-Gas im thermodynamischen Gleichgewicht,

$$n_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} - \mu}{k_B T}} - 1}, \quad N = \sum_{\mathbf{k}\sigma} n_{\mathbf{k}\sigma} \quad (1.2)$$

Die Gleichung (1.2) impliziert die Bedingung²

$$\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} \geq \mu \quad \forall(\mathbf{k}, \sigma) \quad (1.4)$$

mit Gleichheit für den Grundzustand ε_0 . Gölte nämlich $\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} \leq \mu$, für einen angeregten Zustand, so wäre $\varepsilon_0 < \mu$ und damit der Erwartungswert der Grundzustandsbesetzung negativ. Da also für alle angeregten Zustände und Temperaturen $\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} \mu > 0$ gilt, steigt der Nenner von (1.2) mit fallender Temperatur an, wodurch Zustände hoher Einteilchenenergie $\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}$ zunehmend ausgeschlossen werden. Andererseits muss die Gesamtzahl der Atome N in allen Zuständen $|\mathbf{k}\sigma\rangle$ erhalten bleiben. Das System muss diesem Besetzungsausschluss bei hinreichend tiefer Temperatur mittels $\varepsilon_{\mathbf{k}=0\sigma} = \mu$ ausweichen. Dann wird der Erwartungswert des $|\mathbf{k}\sigma\rangle = |\mathbf{0}\sigma\rangle$ Zustands makroskopisch und kann alle Atome aufnehmen, die in angeregten Zuständen nicht unterkommen. Diese Überlegung gründet allein auf der Bose-Einstein-Verteilungsfunktion. BEK ist deshalb ein rein quantenstatistischer Effekt. Deshalb zeigt sie sich besonders ausgeprägt in verdünnten Quantengasen. Im stark wechselwirkenden ^4He ist ein Teil der Systemenergie in der Wechselwirkung zwischen den Teilchen gespeichert. Selbst am Temperaturnullpunkt beträgt der Kondensatanteil nur etwa 8%.

Welche Besonderheiten gewährt die theoretische Beschreibung von BEKen in verdünnten Quantengasen?

Es war die zentrale Erkenntnis von Ginzburg und Landau [23], dass - unabhängig von einem mikroskopischen Verständnis - der kohärente Anteil eines Vielteilchensystems durch eine einzige makroskopische Wellenfunktion Ψ beschrieben werden kann.

E.P. Gross und L.P. Pitaevkii fanden bei der Erforschung von Vortices in Superfluiden 1961 die Wellengleichung zur Ψ -Funktion (Gross-Pitaevskii-Gleichung) [24, 25], welche die Dynamik des kohärenten Systemanteils beschreibt. In stark wechselwirkenden Systemen wie ^4He bleiben infolge des geringen Kondensatanteils innere Freiheitsgrade und die Beschreibung ist unvollständig. In Bose-Einstein-kondensierten verdünnten Quantengasen liefert dagegen die makroskopische Wellenfunktion eine vollständige und quantitative

²Die Fermi-Dirac-Verteilungsfunktion impliziert dagegen keine vergleichbare Einschränkung des chemischen Potentials. Vielmehr liefert

$$n_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} - \mu}{k_B T}} + 1} \quad (1.3)$$

für jeden reellen Wert von μ eine mittlere Besetzungszahl im Intervall $(0, 1]$. Dies drückt das Pauli-Prinzip aus: „Jeder Einteilchenzustand kann entweder unbesetzt oder von einem einzigen Fermion besetzt sein.“

Beschreibung der Dynamik. Das Vielteilchenproblem reduziert sich auf ein effektives Einzelteilchenproblem, wobei die Wechselwirkung zwischen den Teilchen formal als Potential in der Wellengleichung auftritt.

1.4 Spinorkondensate

Ein Spinor-Quantengas ist ein Quantengas mit inneren Spinfreiheitsgraden. Mit Spinorkondensat wird ein derartiges System bezeichnet, sobald mindestens eine Spinkomponente Bose-Einstein-kondensiert vorliegt.

Die ersten BEKe wurden in magnetischen Fallen erzeugt. In diesen können nur Atome mit negativem magnetischen Moment gefangen werden, weil es unmöglich ist, ein Magnetfeld mit einem lokalen Maximum in einer stromfreien Region zu erzeugen. Aus diesem Grund verhalten sich magnetisch gefangene BEKe wie spinentartete bzw. einkomponentige Systeme. Der Spin ist dann „eingefroren“. In optischen Fallen dagegen bleiben die Spinfreiheitsgrade erhalten. Mithilfe von Laserstrahlen wird per AC-Stark-Effekt ein elektrisches Potentialminimum erzeugt, welches die Atome durch Wechselwirkung mit ihrem induzierten elektrischen Dipolmoment lokalisiert.

Die Magnetisierung ist beliebig einstellbar, weil Atome mittels starker magnetischer Wechselfelder ($\approx 150\text{G}$) im Radiofrequenzbereich ($\approx 80\text{Hz}$), genauer mit Populationsinversionsverfahren (ARP, OARP) in andere Hyperfeinzustände angeregt werden können.

Da im stark inhomogenen Magnetfeld eine vom Spinzustand der Atome abhängige Ablenkung derselben geschieht, kann mithilfe einer Stern-Gerlach-Apparatur die Besetzung der einzelnen Zeeman-Niveaus nach Abschalten des Fallenpotentials gemessen werden. Wie später genauer diskutiert, ist die Magnetisierung in BEKen zeitlich erhalten, weshalb der erhaltene Messwert auch die Magnetisierung vor Abschalten der Falle ergibt.

Als Nebeneffekt der Notwendigkeit, (Spinor-)BEKe aus verdünnten Quantengasen in Fallen zu erzeugen, tritt also im Experiment die Kontrollierbarkeit ihrer Magnetisierung auf. Aus diesem Grund werden in dieser Arbeit alle Größen als Funktion der Magnetisierung und nicht als Funktion des (Vakuum)magnetfeldes berechnet.

Im Vergleich zum Magnetismus des Festkörpers bieten Spinorkondensate neben hoher Kontrolle die Vorteile vergleichsweise guter experimenteller Zugänglichkeit und eine Einfachheit der Verhältnisse. So ergibt sich in dieser Arbeit der Magnetismus des Systems auf natürliche Weise, wohingegen der Magnetismus der Festkörper bis heute nicht einheitlich beschrieben werden kann, sondern je nach (künstlich klassifizierter) Erscheinung unterschiedliche, phänomenologisch motivierte Ansätze nötig sind. Spinorkondensate wecken die Hoffnung, durch das hohe Maß an Kontrolle Einsicht in die Übergänge zwischen die-

sen Erscheinungsformen zu finden und einen einheitlichen Standpunkt vorzubereiten. Darüber erfährt die Erforschung derart kontrollierbarer Magnete schon allein durch die hohe technische Potenz und die Tatsache, dass sie als BEK einen neuen Zustand magnetischer Materialien darstellen, Rechtfertigung, die zur Genüge darreicht.

Die Magnetisierung bewirkt ein induziertes Magnetfeld, welches per Zeeman-Effekt eine energetisch gestaffelte Begünstigung der einzelnen Spinzustände befördert. Dies hat eine selektive Kondensation der einzelnen Spinzustände zur Folge, was im Auftreten mehrerer BEK Phasen mündet.

Das erste Spinorkondensat wurde 1998 von Stamper-Kurn et al. in ^{23}Na am MIT erzeugt. [19] Auch mit ^{87}Rb wurde ein Spin $F = 1$ Spinorkondensat erzeugt [26]. Ein Spin $F = 2$ -Kondensat gelang in ^{87}Rb [27]. Die Möglichkeit eines Spin $F = 3$ -Kondensats wurde für ^{52}Cr vorgeschlagen [28]. Die ersten theoretischen Untersuchungen von Spinorkondensaten erfolgen 1998 durch T. Ohmi und K. Machida [29], sowie durch T.L. Ho [30].

1.5 Strukturfaktor und Bragg-Spektroskopie

Der dynamische Strukturfaktor beschreibt das Streuvermögen eines physikalischen Systems bezüglich neutraler Teilchen, genauer die Entstehung kollektiver (\mathbf{q}, E) -Dichteanregungen bei Störung der Teilchendichte des Systems.

Bei der Erforschung von BEKen wird dem dynamischen Strukturfaktor eine Schlüsselrolle zugeordnet: Einerseits ist derselbe, obgleich eine höchst nichttriviale Größe, mittels der Methode der Bragg-Spektroskopie direkt experimentell zugänglich. Andererseits gewährt der dynamische Strukturfaktor mannigfachen Einblick in die Natur des Systems.

So zeigt die Geschichte der Erforschung von superfluidem ^4He , von der Messung des Rotonenspektrums in Neutronenstreuexperimenten, bis hin zur Messung der BEKdichte, was als endgültiger Beweis der Existenz eines BEKs im Superfluid gilt, die Bedeutung dieser Größe.

Auch ist das Absorptionsvermögen an sich von Interesse. Als die ersten BEKe im Labor hergestellt wurden, war deren Wechselwirkung gegenüber Licht fraglich. Der dynamische Strukturfaktor liefert die quantitative Antwort. Als Teilchendichtekorrelationsfunktion gewährt der dynamische Strukturfaktor eine mikroskopische Perspektive, ist eng verknüpft mit dem Teilchendichteanregungsspektrum, gibt Auskunft über die Korrelation von Teilchendichtefluktuationen und liefert exakte Resultate für Messgrößen wie Kompressibilität und Schallgeschwindigkeit. Infolge unmittelbarer Verknüpfung mit der Teilchendichte-Responsefunktion stellt der dynamische Strukturfaktor ferner die thermodynamische Sy-

stemeigenschaft bei Störung der Dichte fern des Gleichgewichts bereit.

Ein Problem bei der Erforschung von BEKen ist, dass im Nanokelvinbereich kein Thermometer existiert. In Anbetracht dieses Mangels könnte die starke Temperaturabhängigkeit des Strukturfaktors dienlich sein. Sobald eine gute Theorie desselben besteht, kann aus den Bragg-Spektroskopischen Messungen die Temperatur ermittelt werden. Schließlich gilt der Strukturfaktor, verglichen mit der Time-of-flight-Methode, als zuverlässige und rauscharme Nachweismethode für BEKe.

F. Zambelli et al. berechneten in Referenz [31] den dynamischen Strukturfaktor von Bose-Gasen mit Bogoliubov-Spektrum im harmonischen Potential in LDA-Näherung bei $T = 0$. K. Baerwinkel [32], sowie J. Bosse et al. [33, 34] entwickelten eine Theorie der Teilchendichte-Spektralfunktion für homogene, ideale Bose-Gase bei endlicher Temperatur. Die im Rahmen dieser Arbeit dargebotene Theorie reproduziert das Ergebnis aus [34] und bietet zudem eine Erweiterung auf ideale Spinor-Bose-Gase, gleichwie auf Systeme in einem harmonischen Potential.

Neben der mikroskopischen Information, der beim Studium von reinen Bose-Einstein Kondensaten in verdünnten Quantengasen eine ebenbürtige Rolle wie bei der Erforschung des ^4He zukommt, hat der Strukturfaktor hier die zusätzliche Bedeutung als im Vergleich zu time-of-flight zuverlässige und rauscharme Nachweismethode.

Wie sich im Laufe dieser Arbeit zeigt, ist der dynamische Strukturfaktor eines BEKes durch einen scharfen deltafunktionsartigen Peak gegeben. Der Peak dient zum Nachweis, dass ein BEK vorliegt.

Die Methode der Bragg-Spektroskopie [35, 36, 37, 38, 39] ist ein Verfahren, mit dem der dynamische Strukturfaktor von BEKen direkt gemessen werden kann.

Nachdem W.H. Bragg und W.L. Bragg 1912 die Braggsche Beugungsgleichung in einer Reihe von Experimenten mithilfe der Drehkristallmethode anhand der Streuung von Röntgenstrahlen an Kristallebenen demonstriert hatten, konnte die Bragg-Streuung von Neutronen De Broglie-Wellen an Kristallebenen 1946 beobachtet werden [40]. 1987 gelang P.J. Martin et al. die Bragg-Beugung des Atomgases ^{23}Na an einer stehenden Lichtwelle [41].

Mit der Erzeugung von BEK 1995 erfuhr das entwickelte Verfahren steigendes Interesse, weil das Kondensat als makroskopisches, physikalisches System infolge seiner Kohärenz als einzelne De Broglie-Welle gestreut wird. Statt seiner einzelnen Atome wird das Kondensat als Ganzes durch Streuung an einem optischen Potential kollektiv angeregt. Die Kohärenz erhält ihren Bestand und der Streuprozess führt zu elementaren Dichteanregungen des Kondensats.

Die Bezeichnung „Bragg-Spektroskopie“ rührt daher, dass einerseits der Streuprozess ei-

ner Bragg-Streuung entspricht, sowie die Atome als Materiewellen und die Maxima der stehenden Lichtwelle als Kristallebene aufgefasst werden, andererseits das Aufnahmeverfahren des Impulsspektrums in seinem Wesen das der Spektroskopie ist. Die Methode wurde erstmals 1997 von Berman und Bian [42] verwendet.

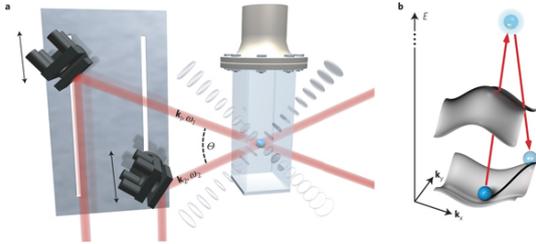


Abbildung 1.2: Aufbau: Zwei Laserstrahlen in festem Winkel θ Licht bei verschiedener Frequenzverstimmung $\nu - \nu_0$ ins Kondensat [39].

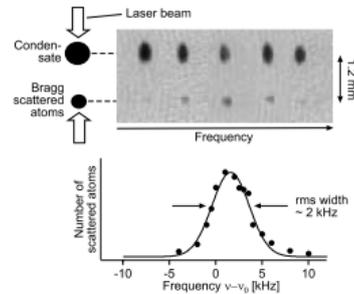


Abbildung 1.3: Messergebnis: Mithilfe der Time-of-flight Methode wird die Anzahl der gestreuten Atome als Funktion der Verstimmung $\Delta\nu$, bei jeweils festem Impulsübertrag zwischen den Lasern gemessen. Durch Vergleich des Gesamtimpulsübertrages mit dem eingestrahlichten Gesamtimpuls folgt die Absorptionswahrscheinlichkeit [37].

Das naheliegendste Verfahren zur Messung des Strukturfaktors ist die Laser-Absorptionsspektroskopie. Dabei wird Laserlicht der Frequenz ν ins System gestrahlt. Ein Detektor im Winkel α zählt die eintreffenden Lichtquanten und analysiert deren Frequenz ν' . Daraus folgt die Anzahl der absorbierten Anregungsquanten, mit Energie $E = 2\pi\hbar(\nu - \nu_0)$ und Impuls $q = 2\pi\frac{\hbar}{c}(\nu - \nu_0) \sin \alpha$.

Im Prinzip funktioniert dieses Verfahren auch für BEKe. Da diese jedoch nur aus etwa $10^5 - 10^7$ Atomen bestehen, stehen so wenige Streuteilchen zu Verfügung, dass das vom Detektor akzeptierte Winkel- und Frequenzintervall so groß gewählt werden muss, um dominant gegenüber dem Hintergrund zu sein, dass die Ergebnisse unbrauchbar werden.

Die Methode der Bragg-Spektroskopie [43, 42, 44, 36] umgeht dieses Problem. Statt eines einzelnen Lasers, strahlen zwei Laser Lichtquanten mit leicht gegeneinander verstimmten Frequenzen ν_1 und ν_2 in einem großen Winkel θ von etwa 166° ins Kondensat. Die Lichtquanten interferieren und erzeugen ein Lichtgitter, an dessen Potential das Kondensat gestreut wird.³

³Genauer: Das Kondensat wird vom energiereicheren Laser angeregt und in Bewegung versetzt und vom anderen Laser zur stimulierten Absorption gebracht. Da die Einstein-Koeffizienten für Absorption und stimulierte Emission gleich sind, kann statt von der stimulierten Emissionswahrscheinlichkeit direkt von der Absorptionswahrscheinlichkeit gesprochen werden. Da nach dem Absorptions-Emissions-Prozess

Mittels der Time-of-flight Methode kann, wie in Abbildung 1.5 dargestellt, die Anzahl der gestreuten Atome detektiert werden. Bei fest eingestelltem Winkel θ , zwischen den Lasern, wird bei jedem Streuprozess derselbe Impuls übertragen. Durch Vergleich von eingestrahlttem Impuls und absorbiertem Gesamtimpuls ergibt sich die Streuwahrscheinlichkeit. Dies wird für verschiedene Verstimmungen $\Delta\nu$ wiederholt, so dass der Strukturfaktor $S(\mathbf{q}, E)$ als Funktion der Energie 1.5 (unten), für feste Anregungswellenzahl \mathbf{q} resultiert.

Der Vorteil der Bragg-Spektroskopie besteht schließlich darin, dass Streuenergie und Impuls *vor* dem Streuprozess über die Verstimmung $\nu_2 - \nu_1$ zwischen den Lasern und dem Winkel θ zwischen ihnen *eingestellt* werden, statt *nach* dem Streuprozess *gemessen* zu werden. Hierdurch ist das Signal an der Stelle E, \mathbf{q} stärker und praktisch rauschfrei. Desweiteren entfällt die oft problematische Frequenzmessung.

Die Laserstrahlen entstammen derselben Quelle um Kohärenz zu gewähren und werden durch Bragg-Streuung in Piezo-Kristallen in zwei Strahlen geteilt. Durch Regelung der anliegenden Spannung kann der Gitterabstand und damit die Frequenzverstimmung zwischen den Laserstrahlen eingestellt werden.

Es sei noch auf die Eindrücklichkeit hingewiesen, mit der die Entwicklung von Bragg-Beugung zu Bragg-Spektroskopie die Komplementarität von Teilchen und Welle demonstriert. Wo im Anbeginn Röntgenlicht an Kristallatomen gebeugt wurde, wird heute das BEK nach demselben Beugungsgesetz als System aus 10^7 Atomen an den optischen Potentialen eines Gitters aus Lichtwellen gestreut.

1.6 Aufbau der Arbeit

Es werden Eigenschaften der Gleichgewichtsthermodynamik und der Dynamik von Quantengasen mit inneren Spinfreiheitsgraden und einem Hamiltonoperator vom Einteilchentyp untersucht.

In Angesicht der bislang nur selektiv durchgeführten Experimente zu Spinorkondensaten, liegt der Fokus auf Vorhersagen zu deren Phänomenologie, die in künftigen Experimenten gemessen werden könnten. Die Berechnungen werden für Bosonen, Fermionen und Maxwell-Boltzmann Gase mit Spin F einheitlich durchgeführt, jedoch aufgrund der BEK in bosonischen Systemen, zuerst nur für Bosonen diskutiert.

Da einerseits BEKe den Mittelpunkt der Betrachtung darstellen und zudem eine komplexere Betrachtung erforderlich machen, werden die Ergebnisse zunächst nur für Bosonen diskutiert und für Fermionen später gesondert dargestellt:

das Kondensat bis auf seinen Bewegungszustand wieder im Ausgangszustand ist, kann der Prozess hinsichtlich übertragener Energie und Impuls als Streuprozess verstanden werden.

In Kapitel 2 werden allgemeine Ausdrücke von Korrelationsgrößen als formaler Ausgangspunkt der folgenden Kapitel abgeleitet.

In Kapitel 3 werden thermodynamische Eigenschaften von Spinor-Bosonen im thermodynamischen Gleichgewicht untersucht. Zunächst wird das System anhand des Hamiltonoperators definiert. Es wird erörtert, warum die Magnetisierung als experimentell kontrollierbarer Parameter aufzufassen ist und wie die Wechselwirkung mit dem induzierten Magnetfeld implizit und exakt berücksichtigt werden kann. Anschließend wird ein vollständiges Gleichungssystem aufgestellt und das T - M -Phasendiagramms, die Kondensatdichte sowie das chemische sowie das magnetochemische Potentials ermittelt.

Gegenstand von Kapitel 4 ist die Systemdynamik. Hierzu werden die Magnetisierungs- und die Teilchenzahldichte-Spektralfunktion, sowie die entsprechenden Strom-Spektralfunktionen bei endlicher Temperatur berechnet. Anschließend werden Ausdrücke für die korrespondierenden statischen Suszeptibilitäten gefunden.

In Kapitel 5 werden Spinor-Bose-Gase hinsichtlich der Eigenschaft der Superfluidität untersucht. Hierzu erfolgt eine kurze Einführung in die Superfluidität auf Basis der Landau-Theorie und eine vergleichende Diskussion der in der Literatur konkurrierenden Definitionen der superfluiden Dichte. Ferner werden der statische und der dynamische Strukturfaktor aus den Ergebnissen des vorigen Kapitels deduziert.

In Kapitel 6 werden die Resultate der Kapitel 4 und 5 für Fermionen ausgewertet. Zudem werden exakte analytische Ausdrücke bei $T = 0$ abgeleitet.

In Kapitel 7 wird der Einfluss eines harmonischen Fallenpotentials auf die Ergebnisse aus Kapitel 2 im Rahmen einer semiklassischen Näherung untersucht. Danach werden die dynamischen Betrachtungen aus Kapitel 4 auf inhomogene Systeme erweitert.

Im Anhang befindet sich eine Darstellung der Methode der Greenschen Funktionen (A) als theoretischer Rahmen dieser Arbeit, sowie der Matsubara-Methode mit einer formalen Ableitung der effektiven Wirkung und der Gross-Pitaevskii-Gleichung (B). Zudem sind dort neben einer Zusammenfassung der ursprünglichen Ideen von Bose und Einstein (C), einige Betrachtungen zum Maxwell-Boltzmann-Gasen aufgeführt. Schließlich finden sich dort Berechnungen (E), die den Fluss der Darstellung behindert hätten und die Definition der zur Erstellung der Abbildungen verwendeten reduzierten Einheiten (F).

Kapitel 2

Theoretische Grundlagen

In diesem Kapitel wird der formale Rahmen dargelegt, dessen Gültigkeit allgemeiner ist, als die späteren Abhandlungen über Spinor-Bosonen. Die physikalische Bedeutung der betrachteten Größen, wie der erhaltenen Resultate findet deshalb erst später, im Rahmen eines konkreten Kontextes eingehende Betrachtung.

Ausgehend von der anschaulichen quantenmechanischen Definition des Teilchendichteoperators eines Vielteilchensystems, wird die Form der Teilchendichte-Green-Funktion begründet. Es folgen analoge Begründungen der Form von Magnetisierungs- und Stromdichte-Green-Funktionen. Hierbei zeigt sich, dass all diese Größen durch Summen über elementare Zweiteilchen-Green-Funktionen ausgedrückt werden können. Die Idee dieses Kapitels besteht ferner in einer allgemeinen Bestimmung dieser Zweiteilchen-Green-Funktionen für Systeme mit Hamiltonoperator vom Einteilchentyp, durch Lösung der Bewegungsgleichung (A.32) mittels geeigneter Kommutatoridentitäten. In gleicher Weise resultieren die üblichen Ausdrücke der Verteilungsfunktionen idealer Quantengase.

2.1 Teilchendichte und Teilchenstromdichte

Der Teilchendichteoperator eines N -Teilchensystems ist definiert als:

$$\hat{N}(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \hat{\mathbf{r}}_i) \quad (2.1)$$

Darin wird über die Ortskoordinaten \mathbf{r}_i aller Teilchen des Systems summiert. Seien $\{|\alpha\rangle\}$ und $\{|\alpha'\rangle\}$ zwei vollständige Orthonormalbasen. Dann lautet der Dichteoperator in die-

sen nach Ergänzen zweier Einheitsmatrizen und Ausnutzen der Vollständigkeitsrelation

$$\hat{N}(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha, \alpha'} |\alpha\rangle \langle \alpha| \hat{N}(\mathbf{r}) |\alpha'\rangle \langle \alpha'| \quad (2.2)$$

Spezielle Wahl einer Basis aus Produkteigenzuständen $|\mathbf{r}\sigma\rangle$ zum Ortsoperator \mathbf{r} und der Projektion \hat{F}_z des Spinoperators $\hat{\mathbf{F}}$ ergibt:

$$N(\mathbf{r}) = \sum_{\sigma_1, \sigma_2 = -F}^F \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \langle \mathbf{r}_1 \sigma_1 | N(\mathbf{r}) | \mathbf{r}_2 \sigma_2 \rangle | \mathbf{r}_1 \sigma_1 \rangle \langle \mathbf{r}_2 \sigma_2 | \quad (2.3)$$

In einer solchen Basis gilt definitiv:

$$\hat{\mathbf{r}} | \mathbf{r}' \sigma' \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \mathbf{r}' | \mathbf{r}' \sigma' \rangle \quad (2.4)$$

Damit gilt auch:

$$\hat{N}(\mathbf{r}) | \mathbf{r}_2 \sigma_2 \rangle = \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \hat{\mathbf{r}}_i) | \mathbf{r}_2 \sigma_2 \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_2) | \mathbf{r}_2 \sigma_2 \rangle \quad (2.5)$$

Verwendung von $\hat{\Psi}_{\mathbf{r}\sigma}^+ | 0 \rangle = | \mathbf{r}\sigma \rangle$ in (2.3), führt mit (2.5) auf:

$$\sum_{\sigma_1, \sigma_2} \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \underbrace{\langle \mathbf{r}_1 \sigma_1 | \mathbf{r}_2 \sigma_2 \rangle}_{\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} \Psi_{\mathbf{r}_1 \sigma_1}^+ \Psi_{\mathbf{r}_2 \sigma_2} \quad (2.6)$$

Nach Ausführen der Integrale lautet der Dichteoperator im Orts-Spin-Fockraum:

$$\hat{N}(\mathbf{r}) = \sum_{\sigma = -F}^F \hat{\Psi}_{\mathbf{r}\sigma}^+ \hat{\Psi}_{\mathbf{r}\sigma} \quad (2.7)$$

Die Fourier-Komponenten des Dichteoperators lauten:

$$\hat{N}_{\mathbf{q}} = \int d^3 r \hat{N}_{\sigma}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} = \sum_{\sigma = -F}^F \int d^3 r \hat{\Psi}_{\mathbf{r}\sigma}^+ \hat{\Psi}_{\mathbf{r}\sigma} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \quad (2.8)$$

Einsetzen von

$$\hat{\Psi}_{\mathbf{r}\sigma} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar^3}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (2.9)$$

$$\hat{\Psi}_{\mathbf{r}\sigma}^+ = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar^3}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^+ e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (2.10)$$

in (2.8) führt nach Ausführen des Integrals auf:

$$\hat{N}_{\mathbf{q}} = \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}'\sigma'} \delta_{\mathbf{q}+\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \delta_{\sigma, \sigma'} \quad (2.11)$$

Ausführen der \mathbf{k}' -Summe liefert schließlich:

$$\hat{N}_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} \quad (2.12)$$

Mithilfe der Kommutatoridentität

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \sigma, \sigma'} [\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}, \hat{a}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\sigma'}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}'\sigma'}]_{-\eta} &= \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \sigma, \sigma'} [\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}, \hat{a}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\sigma'}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}'\sigma'}]_{-\eta} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \delta_{\sigma\sigma'} \\ &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} [\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}, \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}]_{-\eta} \end{aligned} \quad (2.13)$$

folgt durch Einsetzen von (2.12) in (A.2), (A.3) die Teilchendichte-Green-Funktion. Es wird, wie üblich, der Faktor $\frac{1}{V\hbar}$ dazufiniert, damit die Green-Funktion einerseits eine intensive Größe ist und andererseits ein klassischer Limes $\hbar \rightarrow 0$ durchführbar ist. Damit lautet sie im Impuls-Spin-Raum schließlich:

$$G_{N, N^+}^{\text{ret, av}}(\mathbf{q}, t - t') := \frac{1}{V\hbar} G_{N_{\mathbf{q}}, N_{\mathbf{q}}^+}^{\text{ret, av}}(t - t') = \frac{1}{V\hbar} \sum_{\mathbf{k}\sigma} G_{\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}, \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}}^{\text{ret, av}}(t - t') \quad (2.14)$$

Ebenso lautet die Teilchendichte-Spektraldichte nach (A.5)

$$G''_{N, N^+}(\mathbf{q}, t - t') = \frac{1}{V\hbar} \sum_{\mathbf{k}\sigma} G''_{\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}, \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}}(t - t') \quad (2.15)$$

Die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \hat{N}_{\mathbf{r}\sigma}}{\partial t} + \nabla \hat{\mathbf{J}}_{\mathbf{r}\sigma} = 0 \quad (2.16)$$

motiviert die Definition des Teilchenstromdichteoperators:

$$\hat{\mathbf{J}}_{\mathbf{r}\sigma} = \frac{\hbar}{2m} \left[\hat{\Psi}_{\mathbf{r}\sigma}^+ (\nabla \hat{\Psi}_{\mathbf{r}\sigma}) - (\nabla \hat{\Psi}_{\mathbf{r}\sigma}^+) \hat{\Psi}_{\mathbf{r}\sigma} \right] \quad (2.17)$$

In vollständiger Analogie zu obigem Vorgehen finden sich die Fourier Komponenten des Teilchenstromdichteoperators und die entsprechenden Greenfunktionen, sowie die Spektraldichte als:

$$\hat{\mathbf{J}}_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{\hbar}{m} \left(\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2} \right) (\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma} \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}) \quad (2.18)$$

$$G_{J^l, J^{l'}}^{\text{ret, av}}(\mathbf{q}, t - t') = \frac{\hbar}{m^2 V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left(k_{\alpha} + \frac{q_{\alpha}}{2} \right) \left(k_{\alpha'} + \frac{q_{\alpha'}}{2} \right) G_{\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}, \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}}^{\text{ret, av}}(t - t') \quad (2.19)$$

$$G''_{J^l, J^{l'}}(\mathbf{q}, t - t') = \frac{\hbar}{V m^2} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left(k_{\alpha} + \frac{q_{\alpha}}{2} \right) \left(k_{\alpha'} + \frac{q_{\alpha'}}{2} \right) G''_{\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}, \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}}(t - t') \quad (2.20)$$

Da die energieabhängigen Green-Funktionen einfach über eine Fourier-Transformation mit den zeitabhängigen Green-Funktionen zusammenhängen, gelten alle hier aufgeführten Zusammenhänge natürlich auch für energieabhängige Green-Funktionen, sowie die Spektralfunktion.

2.2 Magnetisierung und Magnetisierungsstrom

Der Operator der Magnetisierung ist in Analogie zum Teilchendichteoperator (2.1) definiert:

$$\hat{\mathbf{M}}(\mathbf{r}) := \sum_{i=1}^N \hat{\mathbf{m}}_i \delta(\mathbf{r} - \hat{\mathbf{r}}_i) \quad (2.21)$$

mit $\hat{\mathbf{m}} = \frac{g_F \mu_B}{\hbar} \hat{\mathbf{F}}$ als Operator des magnetischen Moments von Teilchen mit Gesamtspinoperator $\hat{\mathbf{F}}$. Die z-Komponente der Magnetisierung kann mithilfe von

$$\hat{F}^z \hat{\mathbf{r}} | \mathbf{r}' \sigma' \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \mathbf{r}' | \mathbf{r}' \rangle \hbar \sigma' \delta_{\sigma, \sigma'} | \sigma' \rangle \quad (2.22)$$

wie oben in Fock-Raum-Darstellung umgeschrieben werden:

$$\hat{M}^z(\mathbf{r}) = g_F \mu_B \sum_{\sigma=-F}^F \sigma \hat{\psi}_{\mathbf{r}\sigma}^+ \hat{\psi}_{\mathbf{r}\sigma} \quad (2.23)$$

$$\hat{M}_{\mathbf{q}}^z = g_F \mu_B \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sigma \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} \quad (2.24)$$

Ebenso kann für den Magnetisierungsstrom¹ verfahren werden:

$$\hat{\mathbf{J}}_{M^z}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar g_F \mu_B}{2m} \sum_{\sigma=-F}^F \sigma [\hat{\psi}_{\mathbf{r}\sigma}^+ (\nabla \hat{\psi}_{\mathbf{r}\sigma}) - (\nabla \hat{\psi}_{\mathbf{r}\sigma}^+) \hat{\psi}_{\mathbf{r}\sigma}] \quad (2.25)$$

$$\hat{\mathbf{J}}_{M_{\mathbf{q}}^z} = \frac{\hbar g_F \mu_B}{m} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} (\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}) \sigma \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} \quad (2.26)$$

Mit (A.5), (2.13) und dem Faktor $\frac{1}{\hbar V}$ können Magnetisierungs- und Teilchendichte-Spektralfunktion sowie Magnetisierungsstrom- und Teilchenstromdichte-Spektralfunktion

¹Im Folgenden ist allein der Strom von Magnetisierung in z-Richtung $\langle \hat{M}_z \rangle$ relevant. Im Allgemeinen ist der Magnetisierungsstrom kein Vektor, sondern ein Tensor.

mithilfe der Funktion:

$$A(\sigma) := \begin{cases} 1 & ; \text{Teilchen} \\ g_F^2 \mu_B^2 \sigma^2 & ; \text{Magnetisierung} \end{cases} \quad (2.27)$$

in einheitlicher Form geschrieben werden:

$$G''_{\rho, \rho^+}(\mathbf{q}, t - t') = \frac{1}{V\hbar} \sum_{\mathbf{k}\sigma} A(\sigma) G''_{\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}, \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}}(t - t') \quad (2.28)$$

$$G''_{Jl, J'l'}(\mathbf{q}, t - t') = \frac{\hbar}{Vm^2} \sum_{\mathbf{k}\sigma} A(\sigma) \left(k_\alpha + \frac{q_\alpha}{2}\right) \left(k_{\alpha'} + \frac{q_{\alpha'}}{2}\right) G''_{\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}, \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}}(t - t') \quad (2.29)$$

2.3 Allgemeine Lösungen für Systeme mit Hamiltonoperator vom Einteilchentyp

In der Bewegungsgleichung (A.32), steht auf der rechten Seite $G_{[A,H]_-, B}^{\text{ret, av}}(E)$. Gemäß den Definitionen (A.2) und (A.3) gilt die folgende Implikation:

$$[\hat{A}, \hat{H}]_- = \text{const} \cdot \hat{A} \implies G_{[A,H]_-, B}^{\text{ret, av}}(E) \propto G_{A, B}^{\text{ret, av}}(E) \quad (2.30)$$

Dann kann die Bewegungsgleichung (A.32) algebraisch aufgelöst werden. Folgend wird dies ausgenutzt, um mittels der Kommutatoridentitäten aus Abschnitt E.1 allgemeine Ausdrücke spezieller 1- und 2-Teilchen Green-Funktionen von Systemen mit Hamiltonoperator vom Einteilchentyp anzugeben, deren zugehöriges Einteilcheneigenwertproblem $\hat{h}|\Psi\rangle = \varepsilon|\Psi\rangle$ als gelöst vorausgesetzt werden kann. Insbesondere beinhaltet dies die Lösungen für ideale Systeme.

2.3.1 Allgemeine Lösungen

Einteilchengrößen:

Einsetzen von (E.3), (E.5) sowie (E.10), nach Wahl $\hat{O} := \hat{H}$ in (A.32), liefert mit $h_{\alpha\alpha'} = \langle \alpha | \hat{h} | \alpha' \rangle$ die Einteilchen-Green-Funktion:

$$G_{a_\alpha, a_{\alpha'}^+}^{\text{ret, av}}(E) = \frac{\hbar \delta_{\alpha, \alpha'}}{E - h_{\alpha\alpha} \pm i0^+} \quad (2.31)$$

Die entsprechende Spektralfunktion folgt hieraus durch Einsetzen in (A.46) nach Erweiterung mit dem Inversen des komplex konjugierten Nenners von (2.31):

$$\begin{aligned} G_{a_\alpha, a_{\alpha'}^+}^{\text{ret, av}}(E) &= \frac{\hbar \delta_{\alpha, \alpha'}(E - h_{\alpha\alpha} \mp i0^+)}{(E - h_{\alpha\alpha})^2 + (0^+)^2} \\ &= \frac{\hbar \delta_{\alpha, \alpha'}}{(E - h_{\alpha\alpha})^2 + (0^+)^2} \mp i\hbar\pi \delta_{\alpha, \alpha'} \delta(E - h_{\alpha\alpha}) \end{aligned} \quad (2.32)$$

Im letzten Schritt wurde die Dirac-Lorentz Darstellung der Delta-Distribution verwendet:

$$\frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left(\frac{\epsilon}{c^2 + \epsilon^2} \right) = \delta(c) \quad (2.33)$$

Es resultiert:

$$G''_{a_\alpha, a_{\alpha'}^+}(E) = \hbar \delta(E - h_{\alpha\alpha}) \delta_{\alpha, \alpha'} \quad (2.34)$$

Das Spektraltheorem (A.22) liefert hieraus nach Wahl von $\alpha = \alpha'$ mit

$$\eta = \begin{cases} 1 ; \text{Bosonen} \\ 0 ; \text{Maxwell-Boltzmann-Teilchen} \\ -1 ; \text{Fermionen} \end{cases} \quad (2.35)$$

unmittelbar die bekannten Bose-Einstein-, Maxwell-Boltzmann- und Fermi-Dirac-Verteilungsfunktionen:

$$n_\alpha := \langle \hat{n}_\alpha \rangle = \frac{1}{e^{\beta h_{\alpha\alpha}} - \eta} \quad (2.36)$$

Die Verteilungsfunktion ist als Erwartungswert des Besetzungszahloperators $\hat{n}_\alpha = \hat{a}_\alpha^+ \hat{a}_\alpha$ des Quantenzustands $|\alpha\rangle$ definiert und deshalb als Besetzungswahrscheinlichkeit des vollständigen Einteilchenquantenzustands $|\alpha\rangle$ im entsprechenden Vielteilchensystem zu interpretieren.

Zweiteilchengrößen:

Einsetzen von (E.7) und (E.11) nach Wahl von $\hat{O} := \hat{H}$ in (A.32) liefert:

$$G_{a_\alpha^+, a_{\alpha'}^+, a_{\alpha'}^+, a_\alpha}^{\text{ret, av}}(E) = \frac{\hbar(n_\alpha - n_{\alpha'})}{E - (h_{\alpha'\alpha'} - h_{\alpha\alpha}) \pm i0^+} \quad (2.37)$$

Die Spektralfunktion folgt wie oben durch Erweiterung mit dem Inversen des komplex konjugierten des Nenners als:

$$G''_{a_{\alpha}^{+} a_{\alpha'}^{+}, a_{\alpha'}^{+} a_{\alpha}^{+}}(E) = \hbar(n_{\alpha} - \hat{n}_{\alpha'}) \delta\left(E - (h_{\alpha'\alpha'} - h_{\alpha\alpha})\right) \quad (2.38)$$

Weiteres Einsetzen ins Spektraltheorem (A.22) liefert die Korrelationsfunktionen

$$\langle \hat{a}_{\alpha'}^{+} \hat{a}_{\alpha} \hat{a}_{\alpha}^{+} \hat{a}_{\alpha'} \rangle = \frac{n_{\alpha} - n_{\alpha'}}{e^{\beta(h_{\alpha'\alpha'} - h_{\alpha\alpha})} - \eta} \quad (2.39)$$

2.3.2 Beispiele in Impuls-Spin-Darstellung

Es werden die obigen allgemeinen Ausdrücke auf spezielle Systeme in der Impuls-Spin-Basis $\{|\alpha\rangle\} \rightarrow \{|\mathbf{k}\sigma\rangle\}$ spezialisiert.

Für ein freies ideales System im großkanonischen Ensemble gilt:

$$h_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}\sigma} = \langle \mathbf{k}\sigma | \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \mu \hat{1} | \mathbf{k}\sigma \rangle = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu \quad (2.40)$$

Durch Einsetzen in (2.36) folgt die Verteilungsfunktion in Impuls-Spin Basis:

$$n_{\mathbf{k}\sigma} := \langle \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu)} - \eta} \quad (2.41)$$

Zusammen mit

$$h_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma, \mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} = \frac{\hbar^2(\mathbf{k} + \mathbf{q})^2}{2m} - \mu \quad (2.42)$$

folgt durch Einsetzen in (2.38) zusammen mit $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ die Spektralfunktion:

$$G''_{a_{\mathbf{k}\sigma}^{+} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}, a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^{+} a_{\mathbf{k}\sigma}}(E) = \hbar(n_{\mathbf{k}} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) \delta\left(E - (\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} - \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma})\right) \quad (2.43)$$

Durch Einsetzen in (2.28) folgt die Teilchendichte-Spektralfunktion idealer freier Quantengase:

$$G''_{N_{\mathbf{q}}, N_{\mathbf{q}}^{+}} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} (n_{\mathbf{k}\sigma} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}) \delta\left(E - (\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}})\right) \quad (2.44)$$

Ebenso folgt durch Einsetzen von (2.38) in (2.29) die Teilchenstromdichte-Spektralfunktion:

$$G''_{J_{\mathbf{q}}^{l}, J_{\mathbf{q}}^{l'+}} = \frac{1}{V} \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left(k_{\alpha} + \frac{q_{\alpha}}{2}\right) \left(k_{\alpha'} + \frac{q_{\alpha'}}{2}\right) (n_{\mathbf{k}\sigma} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}) \delta\left(E - (\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}})\right) \quad (2.45)$$

Der Hamiltonoperator eines Atoms mit Gesamtspinoperator $\hat{\mathbf{F}}$ in einem Magnetfeld $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$ lautet, wie in Abschnitt 3.1 nachträglich begründet wird:

$$\hat{h} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \mu \hat{1} - \frac{g_F \mu_B}{\hbar} B \hat{F}_z \quad (2.46)$$

Mit $\hat{F}_z |\sigma\rangle = \hbar\sigma$ gilt:

$$h_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}\sigma} = \langle \mathbf{k}\sigma | \hat{h} | \mathbf{k}\sigma \rangle = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu - g_F \mu_B B \sigma \quad (2.47)$$

Einsetzen in (2.36) liefert mit

$$\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - g_F \mu_B B \sigma \quad (2.48)$$

die Verteilungsfunktion:

$$n_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} - \mu)} - \eta} \quad (2.49)$$

Durch Einsetzen von (2.46) und

$$h_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma, \mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} = \frac{\hbar^2 (\mathbf{k} + \mathbf{q})^2}{2m} - \mu - g_F \mu_B B \sigma \quad (2.50)$$

in (2.38) folgt wieder der Ausdruck (2.43) für die Spektralfunktion, weil sich die Spinindizes in der Delta-Funktion aufheben. Durch Einsetzen dieses Ausdruckes in (2.28) folgt die Magnetisierungs- und Teilchendichte-Spektralfunktion für ein ideales freies System in einem Magnetfeld $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$:

$$G''_{N_{\mathbf{q}}, N_{\mathbf{q}}^+} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} A(\sigma) (n_{\mathbf{k}\sigma} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}) \delta(E - (\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} - \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma})) \quad (2.51)$$

Nach Einsetzen von (2.38) in (2.29) lautet die Teilchen- und Magnetisierungsstrom-Spektralfunktion für derartige Systeme in Impuls-Spin-Darstellung:

$$G'''_{J_{\mathbf{q}}^l, J_{\mathbf{q}}^{l'+}} = \frac{1}{V} \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_{\mathbf{k}\sigma} A(\sigma) \left(k_{\alpha} + \frac{q_{\alpha}}{2}\right) \left(k_{\alpha'} + \frac{q_{\alpha'}}{2}\right) (n_{\mathbf{k}\sigma} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}) \delta(E - (\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} - \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma})) \quad (2.52)$$

Der Vergleich von (2.44) mit (2.51) und von (2.45) mit (2.52) zeigt die formale Invarianz der Spektralfunktionen gegenüber der Existenz eines homogenen Magnetfeldes.

Offensichtlich verändert ein an ideale Quantengase angelegtes homogenes Magnetfeld die Form von Teilchendichte-Spektralfunktion und Teilchenstrom-Spektralfunktion nicht. Der einzige Unterschied besteht darin, dass sich die enthaltenen Verteilungsfunktionen verändern. Dies hat beträchtliche Konsequenzen für dynamische Messgrößen, wie den Strukturfaktor und die Nichtgleichgewichtsthermodynamik von Spinor-Quantengases, die in Kapitel 4 diskutiert werden.

Vorbemerkung zu Kapitel 3:

Der Beginn an dieser Arbeit lässt sich durch die Frage „Wie verändern sich Thermodynamik und Dynamik nichtwechselwirkender Quantengase durch ein angelegtes Magnetfeld?“ umreißen. Teilchen derartiger Systeme reagieren per Definition in keiner Weise auf ihr gegenseitiges Verhalten und richten sich deshalb nur im äußeren Feld aus. Es zeigte sich schnell, dass diese Frage ein triviales Problem darstellt, weil das Spektrum eines solches Systems temperaturunabhängig bleibt, so dass die Auswirkungen des Feldes allein in einer konstanten Verschiebung des chemischen Potentials münden. Schließlich kondensierte nur der $\sigma = F$ Zustand und die Kondensationstemperatur stiege proportional zu \mathbf{H} an.

Nach Einsicht in die experimentellen Bedingungen, wie sie in den Abschnitten 1.3 und 1.4 dargestellt sind, wurde klar, dass in BEKen interessanterweise die Magnetisierung ein im Experiment kontrollierbarer, Parameter ist. Wie dieses Kapitel zeigt, war es einerseits möglich das effektiv im System wirkende Magnetfeld als Funktion der Temperatur zu berechnen und andererseits die Wechselwirkung der magnetischen Momente mit dem induzierten Feld in Betracht zu nehmen. Hierdurch wird das Einteilchenenergiespektrum temperaturabhängig, was, so wird gezeigt, insbesondere die Existenz einer zusätzlichen Kondensatphase bewirkt.

Kapitel 3

Allgemeine Charakteristika idealer Spinor-Quantengase

In diesem Kapitel wird die statische Phänomenologie freier Spinor-Quantengase ohne Zwei- und Mehrteilchenwechselwirkung untersucht.

Zunächst wird die allgemeine Form des Hamiltonoperators solcher Quantengase in Magnetfeldern begründet und das System im Sinne der in Abschnitt 1.4 dargebotenen Motivation definiert. Darauf folgt eine Diskussion zur Erhaltung der Magnetisierung, die insbesondere herausstellt, dass die experimentelle Kontrollierbarkeit derselben eine sinnvolle Voraussetzung ist. Anschließend wird simultan zur Teilchenzahlidentität eine entsprechende Identität für die Magnetisierung angesetzt. Für Fermionen und Maxwell-Boltzmann Gase stellen diese Gleichungen ein vollständiges System dar, was die Bestimmung des chemischen Potentials und des induzierten Magnetfeldes ermöglicht.

Für Bosonen ist dieses Gleichungssystem zunächst unterbestimmt, weil der energetisch tiefste Zustand jeder Spinrichtung makroskopische Besetzung erfahren kann, die es zusätzlich zu bestimmen gilt. Erst die stationären Gross-Pitaevskii-Gleichungen komplettisieren das Gleichungssystem für Bosonen. Aus diesem können dann zuerst das Phasendiagramm und die BEK-Dichte aller Spinzustände bestimmt werden, ferner das chemische Potential und das effektiv im System wirkende Magnetfeld. Weitere Untersuchungen zum magnetischen Verhalten idealer Quantengase und von BEKen schließen dieses Kapitel ab.

3.1 Definition des Systems

Dieser Abschnitt beginnt mit der Begründung der allgemeinen Form des Hamiltonoperators magnetisierter Systeme. Anschließend wird die zeitliche Erhaltung der Magnetisierung diskutiert, um sie dann, wie in Abschnitt 1.4 erläutert, als Erhaltungsgröße auffassen zu können.

3.1.1 Hamiltonoperator

Welchen zusätzlichen Term verursacht ein Magnetfeld im Hamiltonoperator

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^N \hat{h}_0 = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \mu \hat{1} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} - \mu \hat{N} \quad (3.1)$$

eines freien idealen N -Teilchen-Systems im großkanonischen Ensemble?

Ein klassisches Teilchen mit magnetischem Dipolmoment \mathbf{m} erfährt durch Wechselwirkung mit einem stationären Magnetfeld \mathbf{B} ¹ die Energieverschiebung:

$$\Delta E = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{B} \quad (3.2)$$

Ebenso verändert sich die Energie eines zufällig aus einem N -Teilchen System im Gleichgewicht herausgegriffenen Teilchens mit magnetischen Moment

$$\mathbf{m} := \langle \hat{\mathbf{m}} \rangle = \frac{g_F \mu_B}{\hbar} \langle \hat{\mathbf{F}} \rangle \quad (3.3)$$

und Hamiltonoperator

$$\hat{h} = \hat{h}_0 - \hat{\mathbf{m}} \cdot \mathbf{B} \quad (3.4)$$

ändert sich im Mittel um

$$\Delta \varepsilon = \langle \Delta \hat{h} \rangle = -\langle \hat{\mathbf{m}} \mathbf{B} \rangle \quad (3.5)$$

Darin bezeichnet $\hat{\mathbf{F}} := \hat{\mathbf{J}} + \hat{\mathbf{I}}$ den Operator des Gesamtspins eines Atoms mit Kernspin $\hat{\mathbf{I}}$ und Gesamtelektronenspin $\hat{\mathbf{J}}$, $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$ das Bohrsche Magneton und $g_F = 1 + \frac{F(F+1) - J(J+1) - I(I+1)}{2F(F+1)}$ den Landé-Faktor. In einem Koordinatensystem in dem $\mathbf{B} \parallel \mathbf{e}_z$ gilt, folgt mit:

$$\hat{\mathbf{F}} \cdot \mathbf{B} = \hat{F}_z B_z = \hbar \sigma B : \quad (3.6)$$

$$\Delta \varepsilon_\sigma = -g_F \mu_B B_z \sigma \quad (3.7)$$

¹Es wird mit $\mu_0 \mathbf{H}$ das Vakuummagnetfeld bezeichnet, mit $\mu_0 \mathbf{M}$ das induzierte Magnetfeld mit \mathbf{M} als Mittelwert des Operators der Magnetisierung $\hat{\mathbf{M}}$ und mit $\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{M} + \mathbf{H}$ das tatsächlich im System auftretende Gesamtmagnetfeld. Letztere ist also die messbare Größe.

Mithilfe der Definition der Magnetisierung eines Systems des Volumens V

$$\mathbf{M} := \langle \hat{\mathbf{M}} \rangle := \frac{1}{V} \sum_i \langle \hat{\mathbf{m}}_i \rangle = \frac{1}{V} \sum_i \mathbf{m}_i = n \langle \hat{\mathbf{m}} \rangle \quad (3.8)$$

lautet der Hamiltonoperator des Gesamtsystems:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \sum_i (\hat{m}_z)_i B_z = \hat{H}_0 - V \hat{M}_z B_z \quad (3.9)$$

In idealen Systemen gibt es nach Definition keine Wechselwirkung zwischen den Teilchen. Die magnetischen Momente der Atome richten sich nur im äußeren Feld $\mu_0 \mathbf{H}$ aus, weil sie in keiner Weise auf das Verhalten der übrigen Teilchen reagieren. (3.7) und (3.9) reduzieren sich auf:

$$\Delta \varepsilon_\sigma^{\text{ideal}} = -g_F \mu_B \mu_0 H_z \sigma \quad (3.10)$$

$$\hat{H}^{\text{ideal}} = \sum_i \hat{h}_i = \hat{H}_0 - \mu_0 V \hat{M}_z H_z \quad (3.11)$$

Tatsächlich spüren die Teilchen natürlich nicht allein das Vakuumfeld $\mu_0 \mathbf{H}$, sondern auch das durch Ausrichtung der magnetischen Momente der anderen Systemteilchen verursachte induzierte Feld $\mu_0 \mathbf{M}$. Die Wechselwirkung der magnetischen Momente geschieht indes mit dem Gesamtmagnetfeld $\mathbf{B} = \mu_0 (\mathbf{H} + \mathbf{M})$. In dieser Arbeit finden deshalb ideale, magnetisierte Quantengase mit $2F + 1$ inneren Spinfreiheitsgraden, bei zusätzlicher Berücksichtigung der Wechselwirkung mit dem induzierten Magnetfeldes (Abschirmeffekt), Betrachtung. Den Ausgangspunkt stellt der Hamiltonoperator in der Form (3.9) dar.

Während die Zustandssumme für (3.10) einfach berechnet werden kann, stellt (3.9) (unabhängig davon ob \mathbf{H} oder \mathbf{M} vorgegeben ist) ein implizites Problem dar, weil \mathbf{B} zunächst unbekannt ist und selbstkonsistent ermittelt werden muss.

3.1.2 Erhaltung der Magnetisierung

Welche Größen sind als vorgegeben aufzufassen? Die im Experiment kontrollierbaren Parameter. Für freie ideale Quantensysteme sind dies üblicherweise Teilchenzahl N , Temperatur T und Volumen V . Durch diese ist das chemische Potential μ im thermodynamischen Gleichgewicht eindeutig festgelegt, weil letzteres durch drei Zustandsgrößen vollständig und eindeutig bestimmt ist. Die Teilchenzahlidentität kann dann als Bestimmungsgleichung für μ aufgefasst werden. Mit (2.49) lautet sie:²

$$N = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \langle \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} \rangle = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} - \mu)} - \eta} \quad (3.12)$$

²Obwohl die Teilchenzahl vorgegeben ist, werden die Berechnungen in dieser Arbeit wie üblich, aus Gründen der Einfachheit anstatt im kanonischen im großkanonischen Ensemble durchgeführt.

Wie ändert sich die Situation in magnetischen Systemen?

Im Hamiltonoperator des magnetisierten Systems (3.9) und im Energiespektrum (2.48) tritt das zunächst unbekannte Gesamtmagnetfeld $\mathbf{B} = \mu_0(\mathbf{H} + \mathbf{M})$ auf. Obige Teilchenzahlerhaltungsgleichung ist damit unterbestimmt und das chemische Potential nicht mehr wie für neutrale Systeme einfach berechenbar.

In Abschnitt 1.4 wurde unter Voraussetzung zeitlicher Erhaltung der Magnetisierung erläutert, dass dieselbe in gleichem Maße wie die Teilchenzahl als im Experiment kontrollierbarer Parameter aufzufassen ist. Diese Kenntnis der Magnetisierung ermöglicht die Verwendung einer zweiten Identität. Mit (3.3), (3.6) und (3.8) kann sie wie folgt geschrieben werden:³

$$M_z = \frac{g_F \mu_B}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sigma n_{\mathbf{k}\sigma} \quad (3.13)$$

Die Gleichungen (3.12) und (3.13) stellen ein vollständiges, implizites Gleichungssystem zur Bestimmung des chemischen Potentials und der B -Feldstärke dar. Die praktische Auswertung beginnt im nächsten Abschnitt. Indessen erfolgt hier noch die Begründung der zeitlichen Erhaltung der Magnetisierung in BEKen:

Da BEKe in Fallenpotentialen erzeugt werden, gibt es keine materielle Umgebung, die zu einer schnellen Relaxation der magnetischen Momente führt. Änderungen der Magnetisierung können also höchstens durch magnetische Dipol-Dipol-Wechselwirkungen verursacht sein, die allerdings so schwach sind, dass in Zeiträumen, die mit der üblichen Lebensdauer eines Bose-Einstein Kondensats (wenn gleichzeitig Teilchenzahlerhaltung angenommen wird, ist die Größenordnung 1s sinnvoll. Vgl. [19]) vergleichbar sind, keine praktisch relevante Änderung der Magnetisierung geschieht.

Speziell für freie, ideale Systeme ist die Magnetisierung sogar streng erhalten, weshalb die Voraussetzung auch für Fermionen und Maxwell-Boltzmann-Gase sinnvoll sind: Da der Operator des magnetischen Spinmoments im Spin-Fock Raum wirkt und $[\hat{\mathbf{F}}, \hat{\mathbf{F}}] = 0$ gilt, folgt $[\hat{\mathbf{M}}, \hat{\mathbf{H}}] = 0$. Damit ist die Magnetisierung gleichzeitig mit der Energie scharf bestimmt. Zusammen mit $\frac{\partial \hat{\mathbf{M}}}{\partial t} = 0$ folgt die zeitliche Erhaltung der Magnetisierung aus der Heisenbergschen Bewegungsgleichung für Operatoren (A.28).

In frühen Studien zu Spinor-Bose-Einstein Kondensaten wurde die Erhaltung der Magnetisierung nicht berücksichtigt. Dies führte zu schlechter Übereinstimmung mit dem Experiment. Yi et al. [45] zeigten, dass der Grundzustand ohne explizite Berücksichtigung der Erhaltung der Magnetisierung vom tatsächlichen Grundzustand bei erhaltener

³Es ist zu beachten, dass im Experiment die momentane Magnetisierung gemessen wird, hier dagegen die Kenntnis des thermodynamischen Mittelwertes $M = \left\langle \hat{M} \right\rangle$ vorausgesetzt wird. Dies stellt jedoch infolge der zeitlichen Erhaltung der Magnetisierung (die im idealen System über eine unendliche Dauer gilt) und der Generalvoraussetzung der statistischen Mechanik „Ensemblemittel=Zeitmittel“ keine zusätzliche Einschränkung der Gültigkeit dar.

Magnetisierung abweicht. In den folgenden Arbeiten fand die Erhaltung der Magnetisierung bereits explizite Berücksichtigung: [46, 47, 48].

3.2 Gleichungssystem zur Thermodynamik

Jetzt werden die Identitäten (3.12) und (3.13) in Bestimmungsgleichungen für das chemische Potential und das Gesamtmagnetfeld im thermodynamischen Gleichgewicht umgeformt. Mathematisch ist dies ein Optimierungsproblem mit zwei Nebenbedingungen: Das thermodynamische Gleichgewicht ist durch Extremalität des Unbestimmtheitsmaßes S unter den Nebenbedingungen vorgegebener Teilchenzahl N und Magnetisierung M charakterisiert. Die Werte der B -Feldstärke und des chemischen Potentials μ resultieren als Werte der Lagrange-Multiplikatoren im thermodynamischen Gleichgewicht. Um den Lagrange-Parameter der B -Feldstärke auf derselben logischen Ebene als Potential zu einem Parameter $M^* = \langle \hat{M}^* \rangle$ begreifen zu können, wie das chemische Potential μ , Potential zur Teilchenzahl $N = \langle \hat{N} \rangle$ ist, wird die dimensionslose Magnetisierung pro Teilchen

$$\hat{\mathbf{M}}^* := \frac{V}{N\mu_B g_F} \hat{\mathbf{M}} \quad (3.14)$$

sowie das magnetochemische Potential α als Größe mit Energiedimension definiert:

$$\alpha := \mu_B g_F B_z =: B^* \cdot \varepsilon_u \quad ; \quad \varepsilon_u : \text{Energieeinheit} \quad (3.15)$$

Der durch (3.9) gegebene Hamiltonoperator des Systems lautet damit:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} - \mu \hat{N} - \alpha N \hat{M}_z^* \quad (3.16)$$

Umschreiben wie in Abschnitt 2.1 ergibt die entsprechende Fock-Raum-Darstellung:

$$\hat{H} = \sum_{\alpha} \hat{a}_{\alpha}^{\dagger} \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \mu - \alpha \hat{M}_z^* \right) \hat{a}_{\alpha} \quad (3.17)$$

3.2.1 Identitäten für Teilchenzahl und Magnetisierung

Die Erhaltungsgleichungen für Teilchenzahl und Magnetisierung dienen folgend als Bestimmungsgleichungen für die Parameter μ und α . Für Bosonen muss jedoch mit Phasenübergängen zwischen Gasphase und Bose-Einstein-kondensierten Phasen gerechnet werden. Hierdurch treten die Besetzungszahlen $n_{\mathbf{0},\sigma}$ der Zustände verschwindenden Impulses $|\mathbf{k}\sigma\rangle = |\mathbf{0}\sigma\rangle$ als zunächst unbestimmte Parameter in den Erhaltungsgleichungen auf⁴.

⁴Es ist zu bemerken, dass sich die Magnetisierung (aber wegen des Kühlmechanismus und des ständigen Verlusts von Teilchen auch die Teilchenzahl) während des Abkühlvorgangs ändert. Der geläufige

Teilchenzahlidentität

$$N = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \langle \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} \rangle \quad (3.18)$$

Nach Definition der Konzentration

$$C_{\mathbf{k}\sigma} := \frac{\langle \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} \rangle}{N} \quad (3.19)$$

gilt:

$$1 - \sum_{\sigma=-F}^F C_{\mathbf{0}\sigma} = \sum_{\sigma=-F}^F \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{0}} C_{\mathbf{k}\sigma} \quad (3.20)$$

In makroskopischen Systemen bilden die Impulsniveaus ein Quasikontinuum, so dass die \mathbf{k} -Summe durch ein Integral ersetzt werden kann⁵. Mit $\sum_{\mathbf{k}} \implies V \int_{\mathbf{k}} \frac{d^3k}{(2\pi)^3}$ und der Teilchendichte $n := \frac{N}{V}$ mit der Verteilungsfunktion (2.49) und (3.19):

$$1 - \sum_{\sigma=-F}^F C_{\mathbf{0}\sigma} = \sum_{\sigma=-F}^F \frac{1}{n} \int_{\mathbf{k} \neq \mathbf{0}} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{e^{\beta(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu - \alpha\sigma)} - \eta} \quad (3.21)$$

Nach Umschreiben des Integrals in sphärische Koordinaten, kann zusätzlich über den Ursprung integriert werden, da der Integrand dort verschwindet. Mit der Definition $\lambda_\sigma := e^{\beta(\mu + \alpha\sigma)}$ gilt weiter:

$$1 - \sum_{\sigma=-F}^F C_{\mathbf{0}\sigma} = \sum_{\sigma=-F}^F \frac{1}{(2\pi)^3 n} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^\theta dk d\theta d\varphi \frac{k^2 \sin \theta}{\lambda_\sigma^{-1} e^{\beta \frac{\hbar^2 k^2}{2m}} - \eta} \quad (3.22)$$

Ausführen der Winkelintegrale ergibt den Faktor 4π . Mit (E.30) folgt:

$$1 - \sum_{\sigma=-F}^F C_{\mathbf{0}\sigma} = \frac{1}{n\eta} \left(\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sum_{\sigma=-F}^F \zeta_{\frac{3}{2}}(\eta\lambda_\sigma) \quad (3.23)$$

Einsetzen der thermischen De Broglie Wellenlänge

$$\lambda_T := \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2\beta}{m}} \quad (3.24)$$

Terminus „Erhaltungsgleichung“ darf nicht darüber hinwegtäuschen, dass die Gleichungen ihrem Wesen nach einfache Normierungsgleichungen/Identitäten sind, weil die hier vorgegebenen Mittelwerte für Teilchenzahl und Magnetisierung erst im Rahmen eines vollständigen Satzes thermodynamischer Größen vollständig bestimmt sind. Insbesondere sind sie temperaturabhängig. Die Lösungen dieser Gleichungen gelten deshalb bei der jeweiligen Temperatur für den dann vorliegenden Wert der Magnetisierung. Deshalb ist es entscheidend, dass die Magnetisierung nach Erreichen der Endtemperatur zeitlich konstant ist und, wie in Abschnitt 1.4 beschrieben, nach Abschalten der Falle ermittelt werden kann.

⁵Im thermodynamischen Limes ist diese Ersetzung natürlich exakt. In endlichen Systemen stellt sie eine sehr gute Näherung dar, solange das System makroskopisch ist. Für zu kleine Systeme sind die großkanonischen Resultate ohnehin unbrauchbar, weshalb die Ersetzung keine zusätzliche Einschränkung bezüglich der Gültigkeit der folgenden Resultate nach sich zieht.

führt auf:

$$1 - \sum_{\sigma=-F}^F C_{\mathbf{0}\sigma} = \frac{1}{\eta n \lambda_T^3} \sum_{\sigma=-F}^F \zeta_{\frac{3}{2}}(\eta \lambda_\sigma) \quad (3.25)$$

Identität der Magnetisierung

Mit (3.14) kann die Identität der Magnetisierung (3.13) umgeschrieben werden in:

$$M^* := M_z^* = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sigma \frac{\langle \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} \rangle}{N} \quad (3.26)$$

Ein System identischer Teilchen mit Gesamtspin F ist dann für $M^* = F$ vollständig polarisiert. Mit (3.19) gilt:

$$M^* - \sum_{\sigma=-F}^F \sigma \frac{C_{\mathbf{0}\sigma}}{N} = \sum_{\sigma=-F}^F \sigma \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{0}} C_{\mathbf{k}\sigma} \quad (3.27)$$

Durch Umformung der \mathbf{k} -Summe wie oben, resultiert nach Einsetzen des mit (3.20)–(3.23) gültigen Ausdrucks

$$\sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{0}} C_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{1}{\eta n \lambda_T^3} \zeta_{\frac{3}{2}}(\eta \lambda_\sigma) \quad (3.28)$$

die folgende Form der Identität der Magnetisierung:

$$M^* - \sum_{\sigma=-F}^F \sigma C_{\mathbf{0}\sigma} = \frac{1}{n \lambda_T^3 \eta} \sum_{\sigma=-F}^F \sigma \zeta_{\frac{3}{2}}(\eta \lambda_\sigma) \quad (3.29)$$

Die Gleichungen (3.25) und (3.29) stellen für Fermionen und Maxwell-Boltzmann Gase zusammen mit $n_{\mathbf{0}\sigma} = 0 \quad \forall \sigma$, ein vollständiges Gleichungssystem zur Bestimmung von μ und α dar. Für Bosonen können die Zustände $|\mathbf{k}\sigma\rangle = |\mathbf{0}\sigma\rangle$ makroskopisch besetzt werden, so dass die Größen $C_{\mathbf{0}\sigma}$ ebenfalls unbekannt sind. Damit liegen für Bosonen nur zwei Gleichungen, aber $2F + 3$ unbekannte Größen vor. Die zur Vervollständigung des Gleichungssystems fehlenden $2F + 1$ Gleichungen liefern die stationären Gross-Pitaevskii-Gleichungen aus B.4. In der Folge betreffen alle Abschnitte dieses Kapitels bis einschließlich Abschnitt 3.3.2 nur Systeme aus Bosonen.

3.2.2 Lösung der stationären Gross-Pitaevskii-Gleichungen

Die $2F+1$ zeitunabhängigen Gross-Pitaevskii-Gleichungen (B.50) lauten mit $E_0 = 0$ damit nach Normierung durch die Gesamtteilchenzahl N und das Systemvolumen V einfach:

$$\left(-\mu - \alpha\sigma\right)C_{\mathbf{0}\sigma} = 0 \quad \forall \sigma \in \{-F, -F+1, \dots, F\} \quad (3.30)$$

Wie erläutert, bilden diese Gleichungen für Bosonen zusammen mit den Identitäten (3.25) und (3.29), ein $2F+3$ dimensionales Gleichungssystem zur Bestimmung der Parameter μ und α sowie den Kondensatdichten $C_{\mathbf{0}\sigma}$.⁶ Es erweist sich als zweckmäßig, zunächst das Teilsystem der Gross-Pitaevskii-Gleichungen aufzulösen. Dies ergibt Nebenbedingungen für Parameter μ , α und $C_{\mathbf{0}\sigma}$, die dann weiter in (3.25) und (3.29) eingesetzt werden können. Die Anzahl der Lösungen kann als Anzahl der Phasen des Systems interpretiert werden, weil sie ausdrücken, welche $|\mathbf{0}\sigma\rangle$ -Zustände makroskopisch besetzt sein können. Die Unternehmung des folgenden Abschnitts ist deshalb die formale Lösung des doppelt unterbestimmten Systems der $2F+1$ Gross-Pitaevskii-Gleichungen (B.50), gleichwie dieselben danach zur Lösung des vollständigen Gleichungssystems verwendet werden. Eine triviale Lösung von (B.50) ist gegeben durch:

1.Lösung - Gasphase:

$$C_{\mathbf{0}-F} = \dots = C_{\mathbf{0}F-1} = C_{\mathbf{0}F} = 0 \quad (3.31)$$

2.Lösung - ferromagnetische Phase:

Es gelte o.B.d.A.⁷

$$B, M \geq 0 \quad (3.32)$$

Die Teilchenzahlerhaltung (3.25) kann offensichtlich nur dann erfüllt sein, wenn

$$\sum_{\sigma=-F}^F \zeta_{\frac{3}{2}}(\eta\lambda_\sigma) = \sum_{\sigma=-F}^F \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(\eta\lambda_\sigma)^l}{l^{\frac{3}{2}}} \quad (3.33)$$

eine konvergente Reihe ist. Mit $\eta = 1$ und $e^x > 0 \forall x \in \mathbb{R}$ muss jeder σ -Summand einzeln konvergieren. Notwendiges Kriterium für die Konvergenz einer unendlichen Reihe ist das

⁶Diese Beschreibung ist trotz Verwendung der Gross-Pitaevskii-Gleichungen im thermodynamischen Limes exakt, da einerseits für ideale Systeme Kondensatanteil und thermischer Anteil separat beschrieben werden können, andererseits die Bogoliubov-Ersetzung $\hat{a}_0 \approx \sqrt{N_0}$ für unendlich große Systeme exakt gilt und schließlich für verschwindende s-Wellen Streulänge auch das Verdünnungskriterium $na_s^3 \ll 1$ perfekt erfüllt ist und somit (wie etwa im Rahmen der Bogoliubov-Theorie einsichtig wird) keine Quantenkorrekturen auftreten. (vgl auch [2])

⁷Umgekehrte Wahl der z-Achse liefert mit obigen Überlegungen den Fall $B, M < 0$.

Nullfolgenkriterium, d.h. die Erhaltung der Teilchenzahl impliziert:

$$\frac{\lambda_\sigma^l}{l^{\frac{3}{2}}} = \frac{e^{l\beta(\mu+\alpha\sigma)}}{l^{\frac{3}{2}}} \xrightarrow{l \rightarrow \infty} 0 \quad (3.34)$$

Es gilt deshalb bei allen Temperaturen und für jeden Spinzustand:

$$\mu + \alpha\sigma \leq 0 \quad (3.35)$$

Mit $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \geq 0$ folgt:

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} - (\mu + \alpha\sigma) \geq 0 \quad \forall k, \sigma, M, T \quad (3.36)$$

Nach (3.32) und (3.15) gilt $\alpha \geq 0$ und damit folgende Gleichungen:

$$(\mu + \alpha\sigma)\sqrt{C_{\mathbf{0}\sigma}} = 0 \quad (3.37)$$

$$-\mu - \alpha\sigma \geq 0 \quad (3.38)$$

$$\alpha \geq 0 \quad (3.39)$$

Die einzige Möglichkeit, diese drei Gleichungen für $\alpha > 0$ widerspruchsfrei zu lösen, ist:

$$-\mu - \alpha F = 0; \quad C_{\mathbf{0}-F} = \dots = C_{\mathbf{0}F-2} = C_{\mathbf{0}F-1} = 0 \quad (3.40)$$

(Wäre $-\mu - \alpha\sigma = 0$ für ein $\sigma \neq F$ folgte $-\mu - \alpha F \leq 0$, im Widerspruch zur zweiten Gleichung)

3.Lösung - antiferromagnetische Phase:

Mit $-\mu = \alpha F$ folgt:

$$\alpha(F - \sigma)\sqrt{C_{\mathbf{0}\sigma}} = 0 \quad \forall \sigma \quad (3.41)$$

Die einzige neue Lösung ist:

$$\alpha = \mu = 0 \quad (3.42)$$

Die Spinzustände $\sigma = -F, \dots, F - 2, F - 1$ kondensieren damit bei vorgegebener Magnetisierung alle bei derselben Temperatur.

Für das vorliegende System existieren insgesamt drei Phasen: Die Gasphase und zwei Bose-Einstein-kondensierte Phasen. Letztere werden aus später ersichtlichen Gründen ferromagnetische Phase und antiferromagnetische Phase genannt. Die $2F+1$ Gross-Pitaevskii Gleichungen waren in der ferromagnetischen Phase redundant, so dass zusätzliche Forderungen nötig sein werden, um ein vollständiges Gleichungssystem für diese Phase zu erhalten.

Diskussion der Lösungen der Gross-Pitaevkii-Gleichungen

Die Lösungen der Gross-Pitaevskii-Gleichungen haben gezeigt, dass für das betrachtete System drei Phasen existieren.

Die physikalische Situation spiegelt sich in den Verteilungsfunktionen (2.49) wie folgt wider: Bei abnehmender Temperatur kondensiert zuerst der energetisch günstigste, der $\sigma = F$ Zustand, in der ferromagnetischen Phase. In dieser sind chemisches und magnetochemisches Potential proportional zueinander, es gilt $\sigma = -\alpha F$, so dass das Argument des $|\mathbf{0}F\rangle$ Zustandes im Exponenten der Exponentialfunktion der Verteilungsfunktion (2.49) verschwindet. Der $|\mathbf{0}F\rangle$ Zustand kann dann makroskopisch besetzt werden. Dabei geht die Magnetisierung $M^* = \sum_{\sigma=-F}^F \sigma n_{\mathbf{k}\sigma}$ vom Gas ins Kondensat über, bis $M^* - F n_{\mathbf{0}F} = 0$ gilt.

Der Gasanteil wird mit abnehmender Temperatur zunehmend feldfrei. Dies manifestiert sich darin, dass σ und α (proportional) gegen Null konvergieren. Das Einteilchenspektrum $\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}$ ist in dieser Kondensatphase wie in der Gasphase noch temperaturabhängig. Sobald so viele Teilchen in den $|\mathbf{k}\sigma\rangle = |\mathbf{0}\sigma\rangle$ Zustand kondensiert sind, dass kein effektives Feld (d.h. $\alpha = 0$) mehr im Gas herrscht, ist keine Spinrichtung mehr energetisch ausgezeichnet. Diese Situation markiert den zweiten kritischen Punkt. Dann gilt $\alpha = \sigma = 0$, so dass die Argumente der $|\mathbf{k}\sigma\rangle = |\mathbf{0}\sigma\rangle$ -Zustände in den Exponentialfunktionen der Verteilungsfunktionen (2.49) aller Spinzustände verschwinden. Die Zustände verschwindenden Impulses aller Spinrichtungen kondensieren dann simultan.

Es ist zu bemerken, dass sich die Bezeichnung „ferromagnetische Phase“ auf die im Kondensat entstehende Ordnung paralleler Spins $\sigma = F$ bezieht. Die Bezeichnung „antiferromagnetische Phase“ bezieht sich dagegen auf den Gasanteil, der in dieser Phase vollständig unpolisiert ist. Keinesfalls dürfen mit den Bezeichnungen Verhältnisse magnetischer Festkörper identifiziert werden. In einem Ferromagneten genügt ein infinitesimales H -Feld zur Erzeugung einer endlichen Magnetisierung. Hier ist die Magnetisierung dagegen ein im Experiment kontrollierbarer Parameter und das effektive Feld nimmt in der ferromagnetischen Phase mit fallender Temperatur durch Entpolarisation des Gasanteils ab.

Es lässt sich resümieren, dass die Existenz des zweiten Phasenübergangs in der Berücksichtigung der Wechselwirkung mit dem induzierten Magnetfeld begründet liegt.

Würde stattdessen ein BEK in einem externen Feld $\mu_0 \mathbf{H}$, ohne Berücksichtigung des induzierten Magnetfeldes betrachtet, wie in der Vorbemerkung erläutert, wäre μ , wie im neutralen System für $T < T_C$, temperaturunabhängig. Die Exponenten in der Exponentialfunktion der Verteilungsfunktionen blieben konstant und es träte kein weiterer Phasenübergang auf.

Auch bei Berücksichtigung von Wechselwirkungseffekten bleibt gemäß Ref. [46] für $F = 1$ eine solche „double condensation“ zu erwarten: Die übrigen Spinzustände kondensieren

erst, sobald $\mu - \alpha\sigma = \mu - \alpha F$ gilt, was nicht eintritt, ehe die Zeeman Aufspaltung durch $\alpha = 0$ aufgehoben ist. Dies ist, wie sich später zeigt, äquivalent zur vollständigen Kondensation der Magnetisierung. Dann aber sind alle Spinzustände entartet und kondensieren gleichzeitig. Dagegen wurde in Ref. [47] berechnet, dass im Falle attraktiver (ferromagnetischer) Zweiteilchenwechselwirkung, wie sie für ^{87}Rb gegeben ist, eine zusätzliche Phase auftritt.

3.3 Charakteristische Größen

Zunächst werden die Kondensationstemperaturen berechnet und das M - T -Phasendiagramm diskutiert. Dadurch sind dann die Grenzen, innerhalb derer die jeweilige Lösung der Gross-Pitaevskii-Gleichung Gültigkeit hat, gegeben. Anschließend wird die Anzahl der Teilchen in den Kondensatzuständen $C_{0\sigma}$ sowie die thermische Konzentration der Zeeman-Zustände $C_\sigma := \sum_{\mathbf{k} \neq 0} C_{\mathbf{k}\sigma}$ bestimmt. Schließlich, wenn die kritischen Temperaturen und die Besetzungszahlen der Kondensatzustände bekannt sind, können die Ergebnisse für $C_{0\sigma}$ der jeweiligen Phase in (3.25) und (3.29) eingesetzt werden, um chemisches und magnetochemisches Potential zu berechnen.

3.3.1 Kritische Temperaturen

Berechnung der kritischen Temperaturen

Auf der Grenze zwischen zwei Phasen gelten die Bedingungen beider angrenzenden Phasen. Es liegen dann jeweils $2F + 4$ Gleichungen zur Festlegung der $2F + 3$ Größen α , μ und $C_{0\sigma}$ vor. Das Gleichungssystem ist einfach überbestimmt, wodurch ein zusätzlicher Parameter festgelegt ist. Dies wird jetzt zur Berechnung der kritischen Temperaturen ausgenutzt.

Auf der Grenze zwischen Gasphase und ferromagnetischer Phase gelten die Nebenbedingungen (3.31) und (3.40). Einsetzen derselben in (3.25) und (3.29) liefert mit (3.24) unmittelbar das folgende implizite Gleichungssystem zur Bestimmung von $T_C^F(M^*, N, V)$ und $\alpha|_{T=T_C^F}(M^*, N, V)$:

$$\frac{1}{n} \left(\frac{mk_B}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sum_{\sigma=-F}^F \zeta_{\frac{3}{2}} \left(e^{\frac{\alpha(\sigma-F)}{k_B T_C^F}} \right) = T_C^F{}^{-\frac{3}{2}} \quad (3.43)$$

$$\frac{1}{n} \left(\frac{mk_B}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sum_{\sigma=-F}^F \sigma \zeta_{\frac{3}{2}} \left(e^{\frac{\alpha(\sigma-F)}{k_B T_C^F}} \right) = T_C^{F-\frac{3}{2}} M^* \quad (3.44)$$

Auf der Grenze zwischen ferromagnetischer und antiferromagnetischer Phase gelten die Bedingungen $\alpha = \mu = 0$ sowie $C_{0\sigma} = 0 \quad \forall \sigma \neq F$. Rein algebraisch folgt ein expliziter Ausdruck für T_C^A : Der Polylogarithmus $\zeta_{\frac{3}{2}}(\eta\lambda_\sigma)$ vereinfacht sich zur Riemannschen-Zetafunktion $\zeta(\frac{3}{2})$ und nach Einsetzen in (3.25) ergibt sich

$$C_{0F}(T_C^A) = \frac{M^*}{F} \quad (3.45)$$

Damit lässt sich (3.29) in folgende Form umschreiben:

$$T_C^A = \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B} \left(\frac{n \left(1 - \frac{M^*}{F} \right)}{\zeta(\frac{3}{2})(2F+1)} \right)^{\frac{2}{3}} \quad (3.46)$$

Eine numerische Lösung von (3.43) und (3.44) ergibt zusammen mit (3.46) das Phasendiagramm 3.1:

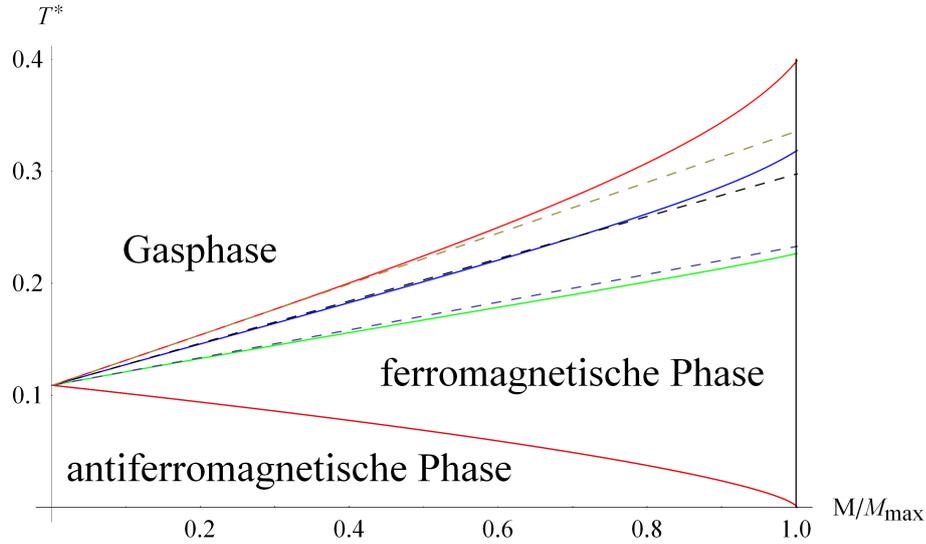


Abbildung 3.1: Phasendiagramm homogener Spinor-Bosonen: Reduzierte kritische Temperatur als Funktion der relativen Magnetisierung. Die oberen Kurven markieren den Übergang zwischen Gasphase und ferromagnetischer Phase, für Bosonen mit Spin 1 (grün), Spin 2 (blau) und Spin 3 (rot). Die untere Kurve zeigt den spinunabhängigen Übergang zur antiferromagnetischen Phase (die drei Kurven liegen übereinander). Die gebrochenen Linien zeigen die jeweils lineare Näherung der oberen Phasengrenze.

Diskussion des Phasendiagramms

Abb. 3.1 zeigt die kritischen Temperaturen für freie, ideale Bose-Gase mit Gesamtspin 1, 2 und 3 in Abhängigkeit der relativen Magnetisierung. Die numerische Lösung für $F = 1$ ist eine Reproduktion des in den Ref. [47, 49] erhaltenen Phasendiagrammes.

Die obere kritische Temperatur markiert den Kondensationsbeginn in die ferromagnetische Phase. Sie steigt für kleine Magnetisierungen fast linear mit derselben an und für hohe Magnetisierungen noch stärker. Kondensation setzt für $M \neq 0$ desto früher ein, je höher der Gesamtspin ist.

Die untere kritische Temperatur beschreibt den zweiten Phasenübergang, zwischen ferromagnetischer und antiferromagnetischer Phase. Sie ist unabhängig vom Teilchenspin und fällt mit steigender Magnetisierung ab. Im vollständig polarisierten System mit $M^* = F$ fällt sie natürlich auf Null ab, weil dann alle Teilchen im $\sigma = F$ Zustand vorliegen.

Beim Übergang vom magnetisierten zum neutralen System gehen die Gleichungen (3.43) und (3.46) mit $M^* \rightarrow 0$ und $\alpha \rightarrow 0$ beide in den bekannten Ausdruck der kritischen Temperatur des neutralen, idealen Bosonengases über:

$$T_C^0 = \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B} \left(\frac{n}{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)(2F+1)} \right)^{\frac{2}{3}} \quad (3.47)$$

Gleichung (3.44) ist dann trivial erfüllt und es gibt nur noch einen Phasenübergang.

Zwecks eines analytischen Verständnisses des linearen Anteils von T_C^F , wird ausgenutzt, dass α für hinreichend kleine Magnetisierungen in $T = T_C^F$ beliebig klein wird. Zur Entwicklung von (3.43) und (3.44) bis zur niedrigsten nichttrivialen Ordnung in α , sei zunächst die Entwicklung von $\zeta_{\frac{3}{2}}(e^x)$ betrachtet. Gemäß der Robinson-Formel [50]⁸

$$\zeta_{\nu}(e^x) = \Gamma(1-\nu)(-x)^{\nu-1} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\zeta(\nu-n)}{n!} x^n \quad \forall \nu \notin \mathbb{N}; \quad \forall x < 0 \quad (3.48)$$

gilt:

$$\zeta_{\frac{3}{2}}(e^x) = \Gamma\left(-\frac{1}{2}\right) \sqrt{-x} + \zeta\left(\frac{3}{2}\right) + x\zeta\left(\frac{1}{2}\right) + \mathcal{O}(x^2) \quad (3.49)$$

Nach Wahl von $x = \frac{\alpha(\sigma-F)}{k_B T_C^F}$ liefern (3.43) und (3.44) mit $c := \frac{1}{n} \left(\frac{mk_B}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}}$ und $\Gamma\left(-\frac{1}{2}\right) = -2\sqrt{\pi}$ für kleine Werte α die folgenden Gleichungen:

$$-c \sqrt{\frac{2\pi\alpha}{k_B T_C^F}} \sum_{\sigma=-F}^F \sqrt{F-\sigma} + (2F+1)c\zeta\left(\frac{3}{2}\right) \approx T_C^{F-\frac{3}{2}} \quad (3.50)$$

⁸In einer naiven Rechnung würden die Reihendefinitionen von Polylogarithmus und Exponentialfunktion eingesetzt und nach der linearen Ordnung abgebrochen. Es zeigt sich jedoch, dass Terme höherer Ordnung schon für beliebig kleine Entwicklungsparameter divergieren. Allein ihre Summe ist endlich. Dieser Korrekturterm wird in der Robinson-Formel berücksichtigt.

$$-c\sqrt{\frac{2\pi\alpha}{k_B T_C^F}} \sum_{\sigma=-F}^F \sigma\sqrt{F-\sigma} \approx M^* T_C^{F-\frac{3}{2}} \quad (3.51)$$

Nach Auflösen gilt mit (3.47):

$$T_C^F = T_C^0 \left(1 + \frac{M^*}{D}\right)^{\frac{2}{3}} + \mathcal{O}(\alpha) = T_C^0 \left(1 + \frac{2}{3D} M^*\right) + \mathcal{O}(M^{*2}) + \mathcal{O}(\alpha) \quad (3.52)$$

Darin ist der vom Teilchenspin abhängige Faktor durch folgenden Term gegeben

$$D := \frac{-\sum_{\sigma=-F}^F \sigma\sqrt{F-\sigma}}{\sum_{\sigma=-F}^F \sqrt{F-\sigma}} = \frac{H_{2F}^{(-3/2)}}{H_{2F}^{(-1/2)}} - F \quad (3.53)$$

Schließlich wurde $\sigma \rightarrow \sigma' = F - \sigma$ substituiert und die verallgemeinerten harmonischen Zahlen $H_n^{(r)} = \sum_{i=1}^n \frac{1}{i^r}$ eingesetzt.

Diese Geraden sind in Abbildung 3.1 als gebrochene Linien gegeben. Es zeigt sich dort, dass der Anstieg der kritischen Temperatur insbesondere für $F = 1$ zunächst tatsächlich in sehr guter Näherung linear in der Magnetisierung ist.

Ein Anstieg der kritischen Temperatur mit der Magnetisierung ist einleuchtend, weil zu erwarten ist, dass die Teilchen den energetischen Vorteil des induzierten Magnetfeldes ausnutzen, um schneller in den Grundzustand zu gelangen: Dies wird anhand der Verteilungsfunktion (2.49) deutlich: Mit steigender Magnetisierung nimmt, wie in Abschnitt 3.3.3 quantifiziert wird, das induzierte Magnetfeld zu, so dass die zum $\sigma = 0$ Zustand symmetrische Zeeman-Aufspaltung der Energieniveaus größer wird. Die energetische Begünstigung der $\sigma = F$ -Zustände nimmt also mit der Magnetisierung zu und damit auch deren Besetzung. Die Besetzung der thermisch angeregten $\sigma = F$ -Zustände, ist also, wie in Abschnitt 1.3 erläutert, schon bei immer höheren Temperaturen ausgeschlossen, so dass Kondensation eintreten muss.

Für die kritische Temperatur des Übergangs zwischen ferromagnetischer und antiferromagnetischer Phase wurde ein exakter, analytischer Ausdruck gefunden. Gleichung (3.46) zeigt, dass der Einfluss der Magnetisierung durch den einfachen Term $\left(1 - \frac{M^*}{F}\right)^{\frac{2}{3}}$ gegeben ist. Dabei ist $\frac{M^*}{F}$ die Magnetisierung relativ zum vollständig polarisierten System, weshalb sich die Kurven für Bosonen mit verschiedenem Spin überdecken.

Dieser Abfall korrespondiert mit folgender physikalischen Situation: In der antiferromagnetischen Phase ist die gesamte Magnetisierung im Kondensat und das Magnetfeld gemäß (3.42) „abgeschirmt“. Die noch nicht kondensierten Teilchen erfahren kein effektives Magnetfeld mehr und die Zeeman-Aufspaltung ist aufgehoben. Es bedarf einer desto längeren Kondensationsphase des $\sigma = F$ -Zustandes, um von der Gasphase mit maximaler Zeeman-Aufspaltung, in diesen Zustand überzugehen.

Auch die Verteilungsfunktion reflektiert dieses Verhalten. Je größer die Magnetisierung ist, desto stärker ist die Zeeman-Aufspaltung und damit die Besetzung des $\sigma = F$ -Zustandes. Die Verteilungsfunktionen der anderen Spinzustände können deshalb bei immer niedrigeren Temperaturen noch alle Teilchen in angeregten Zuständen aufnehmen, wodurch die Ursache der Kondensation, wie sie in Abschnitt 1.3 beschrieben ist, weniger zwingend ist. Der Fall des vollständig polarisierten Systems verdeutlicht dies. Die kritische Temperatur verschwindet und es gibt nur noch Gasphase und ferromagnetische Phase.

3.3.2 Kondensatdichte

Jetzt wird die makroskopische Besetzung der $|\mathbf{0}\sigma\rangle$ -Zustände und die thermische Besetzung der Zeeman-Niveaus als Funktion von Magnetisierung, Teilchendichte und Volumen berechnet. Hierbei wird der Kondensationsmechanismus besonders deutlich.

Berechnung der Kondensatdichte

In der ferromagnetischen Phase gilt nach (3.40) $\mu = -\alpha F$ und $C_{\mathbf{0}\sigma} = 0 \forall \sigma \neq F$. Einsetzen dieser Nebenbedingungen in (3.25) und (3.29) ergibt folgendes implizite Gleichungssystem zur Bestimmung von α und der Kondensatdichte $C_{\mathbf{0}F}$ in der ferromagnetischen Phase:

$$\sum_{\sigma=-F}^F \zeta_{\frac{3}{2}} \left(e^{\frac{\alpha(\sigma-F)}{k_B T}} \right) = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B} \right)^{\frac{3}{2}} n(1 - C_{\mathbf{0}F})T^{-\frac{3}{2}} \quad (3.54)$$

$$\sum_{\sigma=-F}^F \sigma \zeta_{\frac{3}{2}} \left(e^{\frac{\alpha(\sigma-F)}{k_B T}} \right) = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B} \right)^{\frac{3}{2}} n(M^* - FC_{\mathbf{0}F})T^{-\frac{3}{2}} \quad (3.55)$$

Mit (3.43) lässt sich (3.54) in eine suggestivere Form umschreiben:

$$C_{\mathbf{0},\mathbf{F}} = 1 - \left(\frac{T}{T_C^{\mathbf{F}}} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{\sum_{\sigma=-F}^F \zeta_{\frac{3}{2}} \left(e^{\frac{\alpha(\sigma-F)}{k_B T}} \right)}{\sum_{\sigma=-F}^F \zeta_{\frac{3}{2}} \left(e^{\frac{\alpha_C^{\mathbf{F}}(\sigma-F)}{k_B T_C^{\mathbf{F}}}} \right)} \quad (3.56)$$

Darin bezeichnet $\alpha_C^{\mathbf{F}} := \alpha|_{T=T_C^{\mathbf{F}}}$ das magnetochemische Potential am kritischen Punkt zwischen Gasphase und ferromagnetischer Phase.

In der antiferromagnetischen Phase gilt gemäß (3.42) $\mu = 0$ und $\alpha = 0$. Damit besteht das Gleichungssystem mit $2F + 3$ unbekanntem Variablen aus nur 4 Gleichungen. Da mit $\alpha = 0$ der Feldterm im Hamiltonoperator verschwindet, ist in dieser Phase keine der Spinrichtungen mehr energetisch ausgezeichnet. Nach dem Prinzip der Einfachheit⁹ gilt:

$$C_{\mathbf{0}-\mathbf{F}} = \dots = C_{\mathbf{0}F-1} \quad (3.57)$$

Es sei ausdrücklich betont, dass dies eine physikalisch motivierte zusätzliche Forderung darstellt, zu deren Begründung allgemeine Prinzipien zu Rate gezogen werden müssen. Mit der Definition $C'_0 := C_{\mathbf{0}-\mathbf{F}} = \dots = C_{\mathbf{0}F-1}$ folgt nach Einsetzen von (3.42) und (3.57) in (3.29) der Zusammenhang zwischen den Kondensatdichten:

$$C_{\mathbf{0}F} = C'_0 + \frac{M^*}{F} \quad (3.58)$$

Dies relektiert abermals, dass im feldfreien idealen System nur ein Phasenübergang existiert. Insbesondere folgt ein einfacher Ausdruck für die Kondensatdichte am kritischen Punkt zwischen den beiden Kondensatphasen:

$$C_{\mathbf{0}F}|_{T=T_C^A} = \frac{M^*}{F} \quad (3.59)$$

Weiteres Einsetzen in (3.25) ergibt rein algebraisch die folgenden Resultate:

$$C_{\mathbf{0},-\mathbf{F}} = \dots = C_{\mathbf{0}F-1} = \frac{1 - \frac{M^*}{F}}{2F + 1} - \frac{1}{n} \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \left(\frac{mk_B}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} T^{\frac{3}{2}} \quad (3.60)$$

$$C_{\mathbf{0}F} = \frac{1 + 2M^*}{2F + 1} - \frac{1}{n} \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \left(\frac{mk_B}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} T^{\frac{3}{2}} \quad (3.61)$$

Einsetzen von (3.46) in (3.60) und (3.61) zeigt, dass sowohl die Temperaturabhängigkeit in der antiferromagnetischen Phase durch das bekannte $1 - \left(\frac{T}{T_C^0}\right)^{\frac{3}{2}}$ -Verhalten des neutralen Systems gegeben ist, als auch den Einfluss der Magnetisierung als temperaturunabhängige Verschiebungsterme explizit auf:

$$C'_0 = \frac{1}{2F + 1} \left[1 - \left(\frac{T}{T_C^0}\right)^{\frac{3}{2}} - \frac{M^*}{F} \right] \quad (3.62)$$

$$C_{\mathbf{0}F} = \frac{1}{2F + 1} \left[1 - \left(\frac{T}{T_C^0}\right)^{\frac{3}{2}} + 2M^* \right] \quad (3.63)$$

⁹In seinen Regeln zur Erforschung der Natur, schreibt I. Newton: „1. Regel. An Ursachen zur Erklärung natürlicher Dinge nicht mehr zulassen, als wahr sind und zur Erklärung jener Erscheinungen ausreichen. Die Physiker sagen: Die Natur tut nichts vergebens, und vergeblich ist dasjenige, was durch vieles geschieht und durch weniger ausgeführt werden kann. Die Natur ist nämlich einfach und schwelgt nicht in überflüssigen Ursachen der Dinge.“ [51] (In der Originalausgabe der Principia Mathematica wurde „Philosophen“ nicht wie hier in „Physiker“ übersetzt).

Berechnung der thermischen Besetzung der Zeeman-Zustände

Zur Bestimmung der Konzentrationen der thermischen Besetzung der einzelnen Zeeman-Zustände kann Gleichung (3.28) verwendet werden:

$$C_\sigma := \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{0}} n_{\mathbf{k}\sigma} = \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{0}} C_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{1}{\eta n \lambda_T^3} \zeta_{\frac{3}{2}}(\eta \lambda_\sigma) \quad (3.64)$$

Ausgeschrieben lautet dieser Ausdruck in Gasphase (sowie für Fermionen und Maxwell-Boltzmann-Gase), ferromagnetischer und antiferromagnetischer Phase mit (3.31), (3.40) und (3.42):

$$C_\sigma = \frac{1}{\eta n} \left(\frac{mk_B}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} T^{\frac{3}{2}} \zeta_{\frac{3}{2}} \left(\eta e^{\frac{\mu+\alpha\sigma}{k_B T}} \right) \quad (3.65)$$

$$C_\sigma = \frac{1}{n} \left(\frac{mk_B}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} T^{\frac{3}{2}} \zeta_{\frac{3}{2}} \left(\eta e^{\frac{\alpha(\sigma-F)}{k_B T}} \right) \quad (3.66)$$

$$C_\sigma = \frac{1}{n} \left(\frac{mk_B}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} T^{\frac{3}{2}} \zeta \left(\frac{3}{2} \right) \quad (3.67)$$

Darin treten μ und α als unbekannte Parameter auf. Sie werden in Abschnitt (3.3.3) bestimmt. Mithilfe von (3.46) lässt sich die thermische Besetzung in der feldfreien antiferromagnetischen Phase umschreiben in:

$$C_\sigma = \frac{1}{2F+1} \left(\frac{T}{T_C|_{M^*=0}} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (3.68)$$

Die thermische Besetzung jedes Zeeman Zustands erfolgt in der antiferromagnetischen Phase identisch wie für neutrale Systeme im Kondensationsbereich.

Diskussion der Kondensatdichte

Die Abbildungen zeigen die temperaturabhängigen Kondensatdichten und thermischen Besetzungen der Zeeman-Niveaus für Spin-1-, -2- und -3-Bosonen aller Spinzustände bei verschiedenen Magnetisierungen. Zunächst werden die Kondensatdichten diskutiert:

Im Unterschied zu neutralen Bosonen beginnen magnetisierte Spinor-Bosonen die Kondensation allein mit dem $\sigma = F$ Zustand bei der Temperatur $T_C^F > T_C^0$. Dieser Zustand kondensiert so lange einzeln bis $C_{\mathbf{0}F} = \frac{M}{M_{\max}}$ gilt. Dann ist die gesamte Magnetisierung kondensiert und es gilt $\alpha = 0$, was die Entartung der Spinzustände bewirkt. Diese Situation charakterisiert den Übergang zur antiferromagnetischen Phase. Die Kondensatdichten

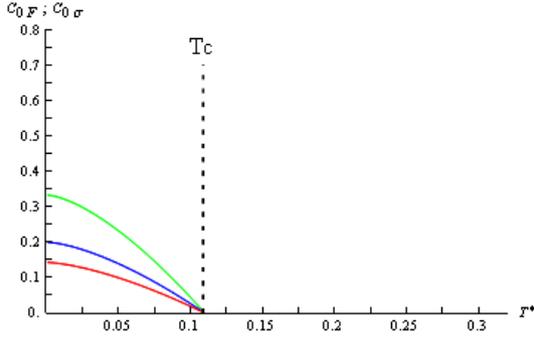


Abbildung 3.2: Kondensatdichte pro Spinzustand als Funktion der Temperatur, für Bosonen mit Spin 1 (grün), Spin 2 (blau) und Spin 3 (rot) bei verschwindender Magnetisierung $\frac{M}{M_{\max}} = 0$. Die gebrochene Linie kennzeichnet den Phasenübergang zur BEK-Phase. Die $|\mathbf{0}\sigma\rangle$ -Zustände sind entartet und identisch besetzt.

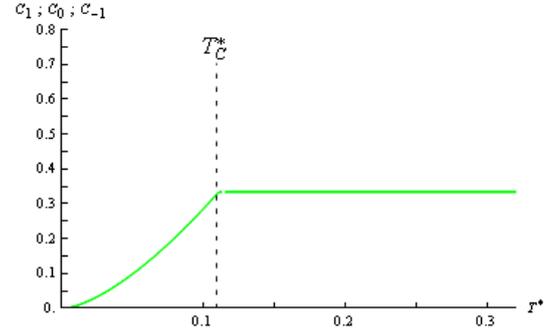


Abbildung 3.3: Thermische Besetzung als Funktion der Temperatur für Bosonen mit Spin 1 bei verschwindender Magnetisierung $\frac{M}{M_{\max}} = 0$. Die gebrochene Linie kennzeichnet den Phasenübergang zur BEK-Phase. Die Zustände $\sigma = -1, 0, 1$ sind spinentartet und identisch besetzt.

zeigen in der antiferromagnetischen Phase sämtlich dasselbe $1 - \frac{T}{T_C^A}$ Temperaturverhalten wie spinentartete Bosonen. Der Unterschied besteht allein in einem in der Magnetisierung linearen Verschiebungsterm. Die Kondensatdichte des $\sigma = F$ -Zustandes zeigt einen „Knick“ bei T_C^A , wie das Einfügen in Abb. 3.4 zeigt. Unterhalb des Phasenübergangs kondensiert der $\sigma = F$ -Zustand langsamer als oberhalb. Der Unterschied ist qualitativ. Die Ergebnisse im Fall $F = 1$ reproduzieren diejenigen aus [47, 49]; jedoch wurde dort in Folge schlechterer Auflösung die qualitative Veränderung des Kondensationsverlaufs bei T_C^A nicht bemerkt. Diese Beobachtungen werden jetzt quantifiziert und hinsichtlich ihrer physikalischen Ursachen diskutiert:

Im neutralen System gibt es nur eine Kondensatphase und die Gleichungen (3.62) und (3.63) werden für $M^* \rightarrow 0$ redundant. Alle Spinzustände zeigen dann das bekannte

$$\frac{1}{2F+1} \left[1 - \left(\frac{T}{T_C} \right)^{\frac{3}{2}} \right] \quad (3.69)$$

Verhalten. Für die antiferromagnetische Phase ergaben sich analytisch, explizite Ausdrücke für die Kondensatdichte: Die Gleichungen (3.62) und (3.63) zeigen, dass der Einfluss der Magnetisierung durch die einfachen Verschiebungsterme $\frac{2M^*}{(2F+1)}$ und $-\frac{M^*}{F(2F+1)}$ gegeben ist. Sie sind linear in der Magnetisierung und temperaturunabhängig. Dieselben sind auf den Kondensationsvorsprung des $\sigma = F$ -Zustandes aus der ferromagnetischen Phase zurückzuführen. Die Magnetisierung beeinflusst die Temperaturabhängigkeit der Kondensatdichte in dieser Phase also überhaupt nicht.

Dagegen bestimmt die Magnetisierung den Temperaturverlauf der Kondensatdichte in der

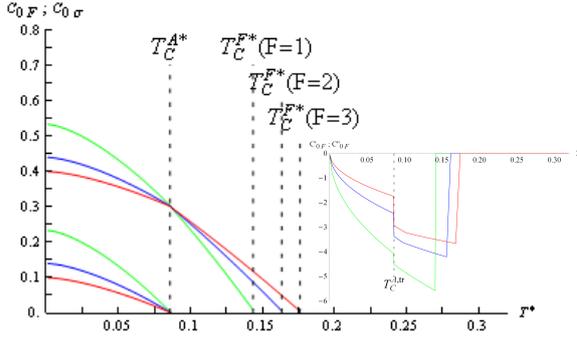


Abbildung 3.4: Kondensatdichte als Funktion der Temperatur, für Bosonen mit Spin 1 (grün), Spin 2 (blau) und Spin 3 (rot) bei fester Magnetisierung $\frac{M}{M_{\max}} = 0.3$. Die oberen Kurven zeigen die Besetzung des $|0F\rangle$ -Zustandes, die unteren Kurven die identische Besetzung aller $|0\sigma \neq F\rangle$ -Zustände. Gebrochene Linien markieren die Phasenübergänge zur ferromagnetischen Phase (T_C^{F*}) und zur anti-ferromagnetischen Phase (T_C^{A*}). Die Einfügung zeigt die erste Ableitung der Kondensatdichte nach der Temperatur.

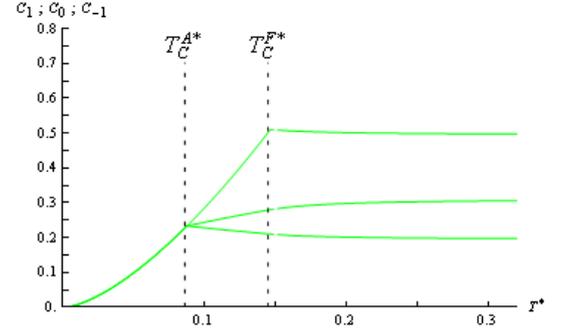


Abbildung 3.5: Thermische Besetzung der Zeeman-Niveaus als Funktion der Temperatur für Bosonen mit Spin 1 bei fester Magnetisierung $\frac{M}{M_{\max}} = 0.3$. Die obere Kurve zeigt die Gesamtbesetzung der $|\mathbf{k} \neq 01\rangle$ -Zustände, die mittlere die der $|\mathbf{k} \neq 00\rangle$ -Zustände und die untere die der $|\mathbf{k} \neq 0 - 1\rangle$ -Zustände. Gebrochene Linien markieren die Phasenübergänge zur ferromagnetischen Phase (T_C^{F*}) und zur anti-ferromagnetischen Phase (T_C^{A*}).

ferromagnetischen Phase wesentlich. Zwecks eines analytischen Verständnisses der qualitativen Veränderung in T_C^A wird der Einfluss der Magnetisierung auf die Temperaturabhängigkeit von C_{0F} in der ferromagnetischen Phase nahe T_C^A explizit dargestellt. Hierzu wird zuerst α als Funktion der Temperatur bestimmt. Das Auflösen von (3.54) und (3.55) nach C_{0F} und anschließendes Gleichsetzen ergibt mit der Definition $c := \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B}\right)^{\frac{3}{2}} n$ eine Bestimmungsgleichung für α in der ferromagnetischen Phase:

$$c\left(1 - \frac{M^*}{F}\right)T^{-\frac{3}{2}} = \sum_{\sigma=-F}^F \left(1 - \frac{\sigma}{F}\right)\zeta_{\frac{3}{2}}\left(e^{\frac{\alpha(\sigma-F)}{k_B T}}\right) \quad (3.70)$$

Das magnetochemische Potential verschwindet in T_C^A und steigt entsprechend der Abb. 3.8 – 3.11 stetig mit der Temperatur. In hinreichender großer Nähe von T_C^A , genügt es, die rechte Seite dieser Gleichung bis zur niedrigsten Ordnung in α zu entwickeln. Mit (3.49) gilt:

$$\sum_{\sigma=-F}^F \zeta_{\frac{3}{2}}\left(e^{\frac{\alpha(\sigma-F)}{k_B T}}\right) \approx (2F+1)\zeta\left(\frac{3}{2}\right) + \sqrt{\frac{\pi\alpha}{k_B T}} \sum_{\sigma=-F}^F \sqrt{F-\sigma} \quad (3.71)$$

Damit folgt aus (3.70):

$$c\left(1 - \frac{M^*}{F}\right)T^{-\frac{3}{2}} = (2F+1)\zeta\left(\frac{3}{2}\right) + \sqrt{\frac{\pi\alpha}{k_B T}}G \quad (3.72)$$

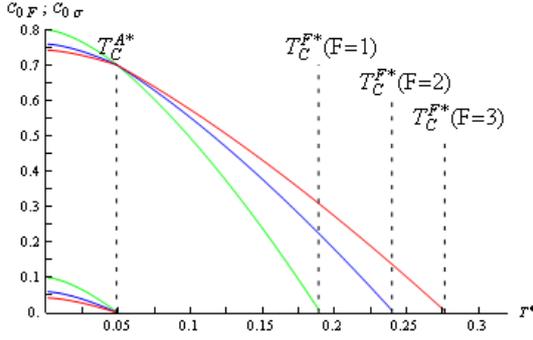


Abbildung 3.6: Wie Abb. 3.4 bei $\frac{M}{M_{\max}} = 0.7$.

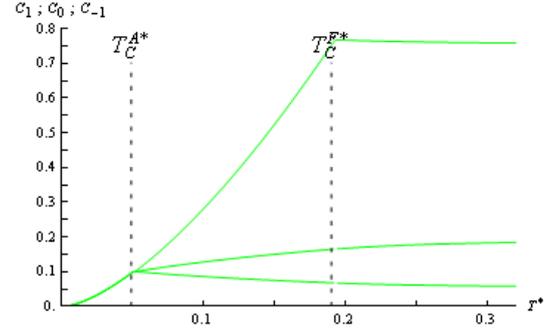


Abbildung 3.7: Wie Abb. 3.5 bei $\frac{M}{M_{\max}} = 0.7$.

Darin ist

$$G := \frac{1}{F} \sum_{\sigma=-F}^F (F - \sigma)^{\frac{3}{2}} \quad (3.73)$$

Aus (3.72) folgt mit (3.46):

$$\sqrt{\alpha} \approx \frac{(2F+1)\zeta\left(\frac{3}{2}\right)}{G} \sqrt{\frac{k_B T}{\pi}} \left[\left(\frac{T_C^A}{T} \right)^{\frac{3}{2}} - 1 \right] \quad (3.74)$$

Aus (3.55) folgt mit (3.71):

$$C_{0F} = \frac{M^*}{F} - \frac{T^{\frac{3}{2}}}{cF} \sum_{\sigma=-F}^F \sigma \sqrt{F - \sigma} \sqrt{\frac{\pi \alpha}{k_B T}} \quad (3.75)$$

Einsetzen von (3.74) liefert:

$$C_{0F} \approx \frac{M^*}{F} + \frac{G'}{F} \left[\frac{T^{\frac{3}{2}} - T_C^{A\frac{3}{2}}}{T_C^{0\frac{3}{2}}} \right] \quad (3.76)$$

Darin ist

$$G' = \frac{\sum_{\sigma=-F}^F \sigma \sqrt{F - \sigma}}{\sum_{\sigma=-F}^F (F - \sigma)^{\frac{3}{2}}} \quad (3.77)$$

gegeben. Auf der anderen Seite der Phasengrenze gilt (3.63). Für die Differenz der Ableitungen von (3.76) und (3.63) an der Stelle T_C^A gilt der folgende exakte Ausdruck:

$$\Delta C'_{0F}|_{T=T_C^A} = \frac{-3}{2T_C^0} \left[\frac{G'}{F} - \frac{1}{2F+1} \right] \left(1 - \frac{M^*}{F} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (3.78)$$

Damit ist auch analytisch einsichtig, dass die Kondensationsgeschwindigkeit des Spin F -Zustandes sich in T_C^A qualitativ verändert.

Die schnellere Kondensation des $\sigma = F$ Zustandes in der ferromagnetischen Phase ist einsichtig, weil in dieser Phase ein effektives Magnetfeld wirkt und den Grundzustand absenkt. Klarer wird dies erneut durch die Verteilungsfunktion vermittelt: In der ferromagnetischen Phase können die Teilchen nur in den Grundzustand, den $\sigma = F$ Zustand kondensieren¹⁰. Andererseits kann auch die Verteilungsfunktion des nächst stärkstbesetzten $\sigma = F - 1$ -Zustandes bald keine Teilchen mehr in den angeregten Zuständen aufnehmen. Diese Teilchen müssen ihren Spinzustand verändern um kondensieren zu können. Die zusätzliche Kondensation von Teilchen aus $|\mathbf{k}\sigma\rangle \neq |\mathbf{k}F\rangle$ -Zuständen in den $|\mathbf{0}F\rangle$ Zustand ist für die beschleunigte Zunahme der Kondensatdichte C_{0F} verantwortlich.

Da jedoch die Systemmagnetisierung erhalten ist, müssen dafür andere Teilchen in einen tieferen Spinzustand übergehen. Dies erklärt den Anstieg der thermischen Besetzung von $\sigma < 0$ -Zuständen bei abnehmender Temperatur in der ferromagnetischen Phase in konsistenter Weise¹¹. Deshalb erreicht die thermische Besetzung des $\sigma = -F$ -Zustandes beim Kondensationsbeginn der $\sigma \neq F$ -Zustände in T_C^A ihr globales Maximum.

Sowie der evidente Übergang in einen tieferen Spinzustand mit einem energetischen Nachteil verbunden ist, lohnt sich eine vermehrte „Abschirmung“ besonders. Die Ausdrücke $\mu - \sigma \neq F\alpha$ in den Verteilungsfunktionen werden deshalb weiterhin kleiner bis schließlich alle Zustände kondensieren können. Die Zahl der Teilchen im $\sigma = F$ Zustand nimmt unterhalb von T_C^{*A} langsamer zu, weil die Teilchen aus anderen Spinzuständen dann in die Kondensatzustände entsprechenden Spins kondensieren können und nicht länger zu Spinumkehr gezwungen sind.

Interessant ist, dass sich die Kondensatdichten am Phasenübergang für verschiedene Gesamtspinwerte überschneiden. Dies bedeutet, dass die Kondensationsgeschwindigkeit von wenigstens zwei konkurrierenden Effekten bestimmt werden: Bei gleicher Gesamtmagnetisierung, setzt für größere Gesamtspinwerte die Kondensation in die antiferromagnetische Phase später ein als für kleine Werte F . Die Kondensatzustände werden dann aber schneller gefüllt, weil die Zeeman-Aufspaltung und damit der energetische Nachteil eines Spinzustandswechsels größer ist. Auch ist die Gesamtzahl der noch nicht kondensierten Teilchen, - die relative Überfüllung des $\sigma = F - 1$ Zustandes, wegen der insgesamt größeren Zahl nicht-kondensierter Teilchen größer.

Schließlich folgt noch eine Bemerkung zur Messbarkeit der späteren Ergebnisse: Die Magnetisierung verändert sich mit der Temperatur und kann erst nach Abschalten der Falle gemessen werden. Es ist deshalb nicht möglich, die gezeigten Graphen der Kondensatdichte in einem Durchlauf nachzumessen. Allein es ist am Ende des Experiments die Magnetisierung bei Endtemperatur bekannt, so dass in jedem Durchlauf ein Vergleichspunkt

¹⁰Anderenfalls wäre mit $\alpha > 0$ und $\mu = -\alpha F$ die thermisch Besetzung energetisch hinreichend hoher $\sigma \neq F$ -Zustände negativ. In der antiferromagnetischen Phase ist das Spektrum mit $\alpha = 0$ nicht länger von der Magnetisierung abhängig und damit ist der Grundzustand für alle Spinzustände derselbe.

¹¹Im Rahmen des Gesagten ist dieser Anstieg nur für den $\sigma = -F$ Zustand logisch evident.

erhalten wird.

Diskussion der thermischen Besetzung der Zeeman-Zustände

Es wird jetzt die thermische Besetzung der Zeeman-Zustände für Bosonen diskutiert: Hier ist zu erkennen, dass alle Spinzustände in der antiferromagnetischen Phase thermisch gleich besetzt sind und mit steigender Temperatur stark ansteigen. In der ferromagnetischen Phase steigt die thermische Besetzung des $\sigma = F$ -Zustandes weiter schnell an. Dagegen steigt die Besetzung des $\sigma = 0$ -Zustandes langsam, und die des $\sigma = -F$ -Zustandes fällt sogar ab. In der Gasphase verändern sich die thermischen Besetzungen der Zeeman-Zustände kaum noch. Der Einfluss der Statistik verliert sich und sie konvergieren gegen die klassischen Werte.

Die thermische Besetzung der Zeeman-Niveaus in der antiferromagnetischen Phase ist unabhängig vom anliegenden Magnetfeld und damit für alle Spin-Zustände gleich. Sie zeigt das bekannte $\left(\frac{T}{T_C}\right)^{\frac{3}{2}}$ -Verhalten. Dies liegt natürlich erneut darin begründet, dass in dieser Phase das im System wirkende Magnetfeld abgeschirmt ist.

Um die Aufspaltung der thermischen Besetzung in der ferromagnetischen Phase zu verstehen sei (3.56) betrachtet. Für $\sigma = F$ gilt $\zeta_{\frac{3}{2}}\left(e^{\beta\alpha(\sigma-F)}\right) = \zeta\left(\frac{3}{2}\right)$. In der ferromagnetischen Phase setzt also C_σ den $\left(\frac{T}{T_C}\right)^{\frac{3}{2}}$ -Anstieg fort. In Abschnitt 3.3.3 wird klar, dass α in der ferromagnetischen Phase schneller als linear mit der Temperatur ansteigt. Deshalb fällt $\zeta_{\frac{3}{2}}\left(e^{\beta\alpha(\sigma-F)}\right)$ mit steigender Temperatur schnell ab, und zwar desto schneller je kleiner σ ist. Im Fall $\sigma = -F$ fällt der Polylogarithmus sogar schneller als mit $T^{-\frac{3}{2}}$. Die Behandlung des Maxwell-Boltzmann-Gases in Anhang D erklärt die Grenzwerte, gegen die die thermische Besetzung der Zeeman-Zustände bei hohen Temperaturen konvergiert. Die Besetzung der Zeeman-Niveaus für tiefe Temperaturen ist auch für Fermionen interessant. Für hohe Temperaturen sind sie natürlich durch die Resultate des Maxwell-Boltzmann-Gases gegeben.

3.3.3 Chemisches und magnetochemisches Potential

Es sind jetzt die BEK-Dichten $C_{0\sigma}$ in allen Phasen bekannt und können in den durch die kritischen Temperaturen begrenzten Intervallen in die Gleichungen (3.25) und (3.29) eingesetzt werden. Diese bilden damit auch für Bosonen ein vollständiges Gleichungssystem zur Bestimmung des chemischen und des magnetochemischen Potentials. Um Missverständnissen vorzubeugen, wird nochmals betont, dass mit den Bezeichnungen „ferromagnetische“ und „antiferromagnetische Phase“ keinesfalls die magnetischen Verhältniss in

Festkörpern in Verbindung gebracht werden können, sondern, dass sich dieselben allein auf die im Kondensatanteil entstehende bzw. die in der Gasphase vorliegende Ordnung beziehen.

Berechnung des chemischen und magnetochemischen Potentials

Für Temperaturen $T > T_C^F$, können (3.25) und (3.29) unter der Nebenbedingung (3.31) direkt numerisch gelöst werden. Für $T \in [T_C^A, T_C^F]$ bilden (3.25) und (3.29) nach Einsetzen von (3.40) sowie den Lösungen für C_{0F} aus (3.54) und (3.55) ein vollständiges Gleichungssystem zur Bestimmung von α und μ . Für $T \leq T_C^A$ sind α und μ direkt durch (3.42) gegeben.

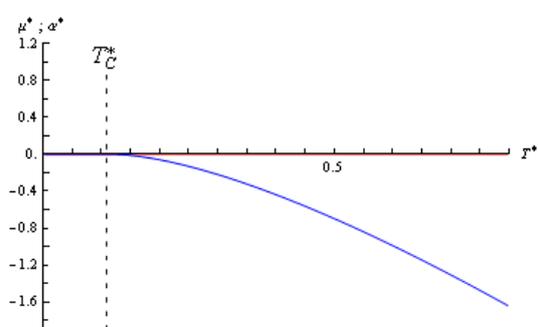


Abbildung 3.8: Temperaturabhängiges chemisches Potential (blau) und magnetochemisches Potential (rot) für Bosonen mit Spin 1 bei fester Magnetisierung $\frac{M}{M_{\max}} = 0$. Die gebrochene Linie kennzeichnet den Phasenübergang.

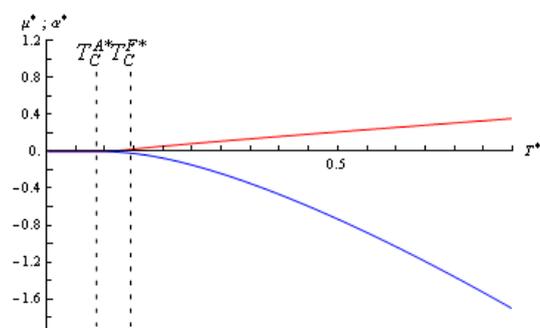


Abbildung 3.9: Temperaturabhängiges chemisches und magnetochemisches Potential für Bosonen mit Spin 1 bei fester Magnetisierung $\frac{M}{M_{\max}} = 0.3$. Gebrochene Linien markieren die Phasenübergänge zur ferromagnetischen Phase (T_C^{F*}) und zur antiferromagnetischen Phase (T_C^{A*}).

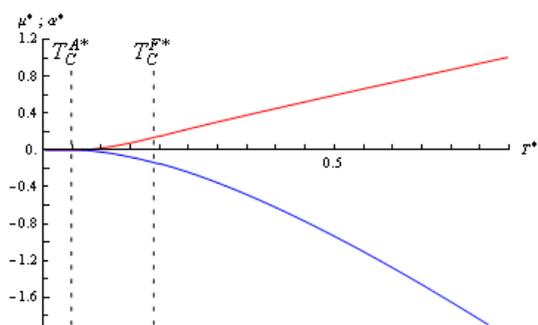


Abbildung 3.10: Wie Abbildung 3.9 bei $\frac{M}{M_{\max}} = 0.7$.

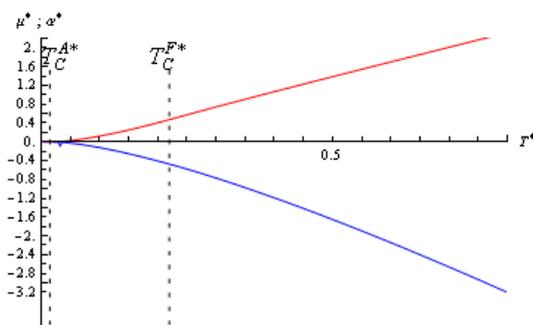


Abbildung 3.11: Wie Abbildung 3.9 bei $\frac{M}{M_{\max}} = 0.95$.

Diskussion des induzierten Magnetfeldes

Die Abbildungen 3.8 – 3.11 zeigen das chemische Potential und das im System wirkende Magnetfeld für Bosonen mit unterschiedlichem Gesamtspin bei verschiedener Magnetisierung als Funktion der Temperatur. Das Ergebnis des chemischen Potentials reproduziert im Spezialfall $M = 0$ das bekannte Ergebnis [52].

Das chemische Potential ist eine in Temperatur, Magnetisierung und Gesamtspin monoton fallende Funktion und liegt zudem für Bosonen stets unterhalb des chemischen Potentials von Fermionen (vgl. Abschnitt 6.1.1). Das magnetochemische Potential ist eine entsprechend ansteigende Funktion. Die Abbildungen zeigen fern des Kondensationsbereichs bei beliebiger Magnetisierung einen fast linearen Anstieg des Magnetfeldes mit der Temperatur. Spinor-Bosonen folgen in der Gasphase einem Curie-Gesetz und zeigen, wie freie klassische magnetische Momente, ein paramagnetisches Verhalten (vgl. Abschnitt D). Nahe des Kondensationsbeginns bleibt der Einfluss der Statistik jedoch merklich und es gibt Abweichungen vom Curie-Verhalten. Für Bosonen verschwinden chemisches und magnetochemisches Potential in der antiferromagnetischen Phase. Die Magnetisierung ist vollständig kondensiert und das System dabei feldfrei. Die Magnetisierung ist unverändert und die magnetischen Momente sind im Kondensat parallel ausgerichtet. Trotzdem wirkt kein messbares Magnetfeld im System. Dies zeigt, dass die Magnetisierung des Kondensatanteils kein im Experiment messbares Feld erzeugt. Zum magnetischen Verhalten des Systems tragen nur die magnetischen Momente des Gasanteils bei. Diese Art der Entkopplung des BEKs ist bemerkenswert. Offenbar sind die Atome nicht allein räumlich eingefroren, sondern auch ihre magnetischen Momente. Sie reagieren in keiner Weise auf ihr gegenseitiges Verhalten, so dass kein Feld induziert wird. Was hier als rätselhaftes Faktum stehen bleiben muss, kann beim Studium der kollektiven Magnetisierungsanregungen in Abschnitt 4.2.4 auf die Kohärenz des Systems zurückgeführt werden.

Das BEK friert die Magnetisierung ein, ohne dass von dieser eine messbare Konsequenz ausgeht. Der Kondensatanteil reagiert deshalb auch umgekehrt, in keiner Weise auf ein zusätzliches, von außen angelegtes H-Feld. Die magnetische Suszeptibilität $\chi = \frac{\partial M(H)}{\partial H} = \frac{\partial B(H)}{\partial H} - 1$ hat in der antiferromagnetischen Phase den Wert -1 . In diesem Sinne zeigen (ungeladene) Spinor-Bosonen bei hinreichend tiefer Temperatur einen Meißner-Ochsenfeld Effekt. In der dazwischen liegenden ferromagnetischen Phase kondensiert die Magnetisierung. Sie geht vom Gasanteil ins Kondensat über. Dadurch stehen weniger solche magnetischen Momente als in der Gasphase zu Verfügung, die einen Beitrag zum induzierten Magnetfeld leisten. Das Magnetfeld nimmt deshalb langsamer als linear mit der Temperatur zu.

Zusammen mit (3.74) läßt sich resümieren: Das induzierte Magnetfeld idealer Spinor-Bosonen verschwindet in der antiferromagnetischen Phase, steigt in der ferromagnetischen Phase zunächst wie $\sqrt{T} \left[\left(\frac{T_C^A}{T} \right)^{\frac{3}{2}} - 1 \right]^2$ und in der Gasphase fast linear.

Analytischer Ausdruck des Curie-Gesetzes in linearer Näherung

Zwecks eines analytischen Verständnisses des Curie-Verhaltens $B \propto TM$ werden die Gleichungen (3.25) und (3.29), durch welche α in der Gasphase bestimmt ist, bezüglich α linearisiert. Die Entwicklung

$$\zeta_{\frac{3}{2}}(e^{\beta(\alpha+\sigma)}) = \zeta_{\frac{3}{2}}(e^{\beta\mu}) + \beta\alpha\sigma\zeta_{\frac{1}{2}}(e^{\beta\mu}) + \mathcal{O}(\alpha^2) \quad (3.79)$$

liefert nach Auswertung der Summen:

$$\frac{2F+1}{\eta n \lambda_T^3} \zeta_{\frac{3}{2}}(e^{\frac{\mu}{k_B T}}) + \mathcal{O}(\alpha^2) = 1 \quad (3.80)$$

$$\frac{F(F+1)(2F+1)}{3M^* \eta n \lambda_T^3} \frac{\alpha}{k_B T} \zeta_{\frac{1}{2}}(e^{\frac{\mu}{k_B T}}) + \mathcal{O}(\alpha^3) = 1 \quad (3.81)$$

Ein Vergleich der beiden Terme ergibt:

$$\alpha = \frac{3T k_B M^* \zeta_{\frac{3}{2}}(e^{\frac{\mu}{k_B T}})}{F(F+1) \zeta_{\frac{1}{2}}(e^{\frac{\mu}{k_B T}})} \quad (3.82)$$

Dabei ist, weil der Ausdruck nur im Grenzfall $M^* \rightarrow 0$ exakt gilt, für das chemische Potential der Wert des neutralen Systems einzusetzen. Der Ausdruck (3.82) ist identisch mit dem in Referenz [53] abgeleiteten Ergebnis und gilt für alle Temperaturen $T > T_C^F$ in linearer Näherung in der Magnetisierung.

In Ref. [53] wurde die magnetische Suszeptibilität ausgehend von einer dynamischen Rechnung in linearer Response Näherung berechnet. Im Spezialfall ungeladener Teilchen sind hierdurch die Wechselwirkungen mit dem induzierten Magnetfeld in linearer Ordnung explizit berücksichtigt. Das dort erhaltene Ergebnis ist identisch mit (3.82). Dies zeigt erneut, dass die Wechselwirkung mit dem induzierten Magnetfeld hier auf implizite Weise richtig berücksichtigt wurden.

Das Ergebnis (3.82) reflektiert in analytischer Form, dass der Anstieg von $\alpha(T)$ tatsächlich nur näherungsweise linear ist. Im Grenzfall hoher Temperatur, wenn sich der Einfluss der Quantenstatistik verliert, geht die magnetische Suszeptibilität in die unterscheidbarer Teilchen (D) über. Für die führende Ordnung gilt mit $\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{\mu(T)}{T} = -\infty$

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{\zeta_{\frac{3}{2}}(e^{\frac{\mu}{k_B T}})}{\zeta_{\frac{1}{2}}(e^{\frac{\mu}{k_B T}})} = 1 \quad (3.83)$$

und damit:

$$\alpha = \frac{F(F+1)k_B T M}{2} \quad (3.84)$$

Dieser Ausdruck ist identisch mit der führenden Ordnung, des entsprechenden, temperaturunabhängigen, für Maxwell-Boltzmann-Teilchen gültigen Ausdruckes D.11.

Diskussion des chemischen Potentials

Das chemische Potential gibt die Energiedifferenz zwischen einem $N+1$ -Teilchensystem im thermodynamischen Gleichgewicht und einem N -Teilchensystem im selben Zustand an. Es werden jetzt die physikalischen Ursachen dafür angeführt, dass es eine mit Temperatur, Magnetisierung und Gesamtspin monoton fallende Funktion darstellt.

Ersteres liegt konsequenter Weise darin begründet, dass die thermische Energie der Teilchen mit steigender Temperatur größer wird, und damit auch der Energieaufwand, um dem System ein Teilchen derart hinzuzufügen, dass es danach wieder im selben Zustand ist. Je größer die Magnetisierung ist, desto stärker ist auch die zum $\sigma = 0$ -Zustand symmetrische Zeeman-Aufspaltung: Der Verteilungsfunktion entsprechend werden die durch Zeeman-Aufspaltung energetisch begünstigten Spin-Zustände verstärkt besetzt. Die Aufspaltung, welche mit steigender Magnetisierung anwächst, führt zu einer Abnahme der mittleren Energie pro Teilchen. Deshalb fällt auch die Energie, um einem thermodynamischen Gleichgewichtssystem ein Teilchen derart hinzuzufügen, dass es danach wieder im selben Zustand ist. Folglich steigt das chemische Potential mit zunehmender Magnetisierung. Dieser Effekt ist bei gleicher relativer Magnetisierung $\frac{M^*}{F}$ desto ausgeprägter, je größer der Gesamtspin des Systems ist, weil σ dann höhere Werte annehmen kann. Das chemische Potential liegt für Bosonen tiefer als für Fermionen (6.1.1). Dies reflektiert die in Abschnitt 1.2 erläuterte statistische Wechselwirkung zwischen den Teilchen. Bosonen ziehen einen energetischen Vorteil aus der Anwesenheit eines zusätzlichen Teilchens, während für Fermionen die Pauli-Abstoßung einen energetischen Aufwand bedeutet. Dieser Unterschied ist vor allem bei tiefen Temperaturen relevant, weil einerseits die thermische de Broglie-Wellenlänge bei hoher Temperatur klein wird, so dass die Teilchen ein zunehmend unabhängiges Verhalten zeigen und andererseits der Effekt im Verhältnis zur thermischen Energie der Teilchen an Relevanz verliert.

3.3.4 Magnetische Suszeptibilität

Es interessiert schließlich noch die Abhängigkeit des im System wirkenden Magnetfeldes von der Magnetisierung. Hierzu sind zunächst diejenigen kritischen Magnetisierungen zu bestimmen, bei denen, für konstante Temperatur, der Phasenübergang stattfindet.

Anstatt der Temperatur wäre es ebenso möglich gewesen, in überbestimmten Gleichungssystem in Abschnitt 3.3.1 die Magnetisierung festzulegen. Bezüglich des Übergangs von Gasphase zu ferromagnetischer Phase liefern (3.25), (3.29), (3.31) und (3.40):

$$\frac{1}{n} \left(\frac{mk_B}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sum_{\sigma=-F}^F \zeta_{\frac{3}{2}} \left(e^{\frac{\alpha_C^F(\sigma-F)}{k_B T}} \right) = T^{-\frac{3}{2}} \quad (3.85)$$

$$\frac{1}{n} \left(\frac{mk_B}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sum_{\sigma=-F}^F \sigma \zeta_{\frac{3}{2}} \left(e^{\frac{\alpha_C^F(\sigma-F)}{k_B T}} \right) = T^{-\frac{3}{2}} M_C^F \quad (3.86)$$

Für den Übergang zwischen ferromagnetischer und antiferromagnetischer Phase ergibt sich mit (3.25), (3.29), (3.40) und (3.42) wieder ein rein analytisches Resultat:

$$M_C^A = F \left[1 - (2F + 1) \frac{1}{n} \left(\frac{mk_B}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \zeta\left(\frac{3}{2}\right) T^{\frac{3}{2}} \right] \quad (3.87)$$

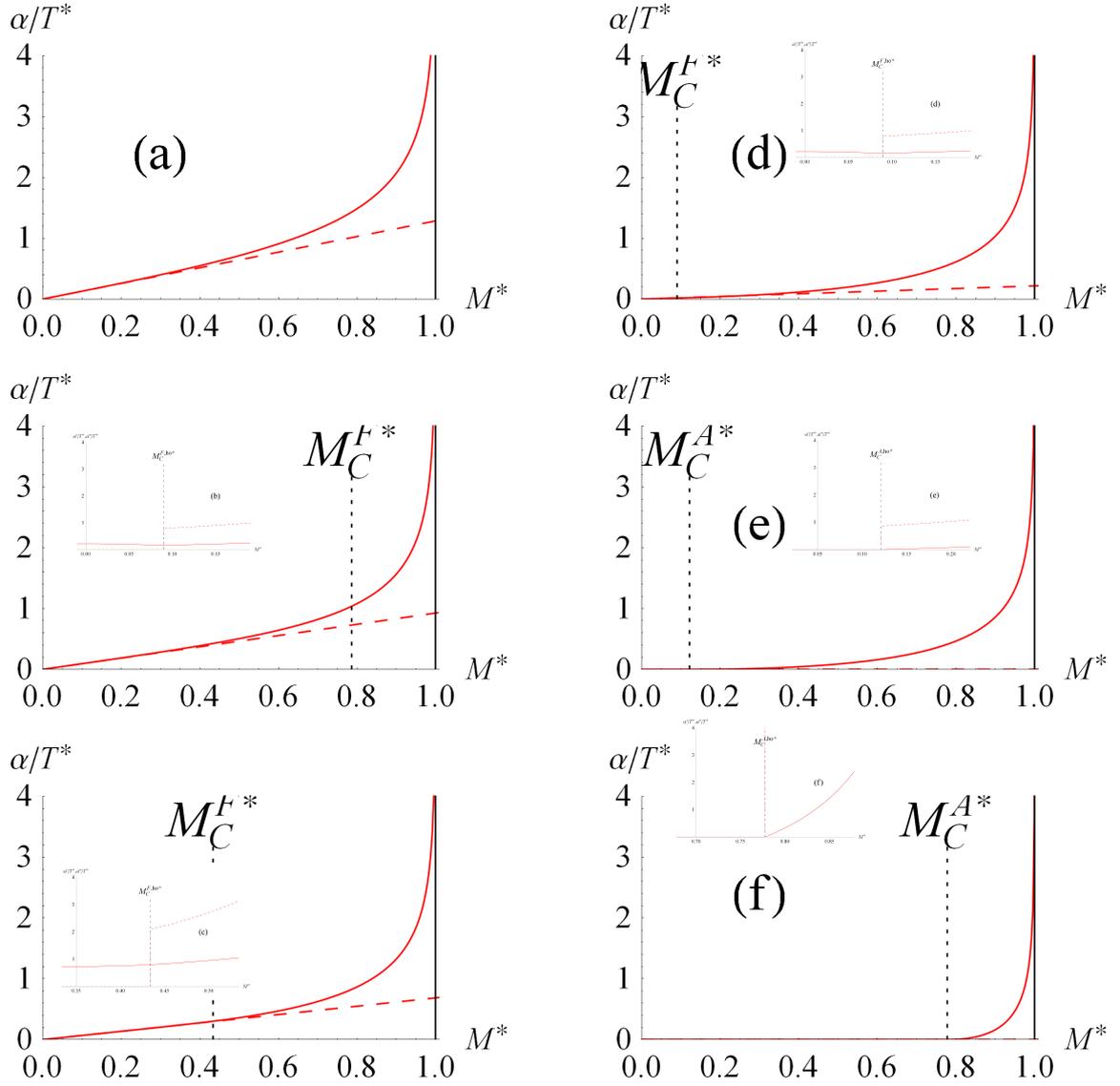


Abbildung 3.12: Innere magnetische Suszeptibilität: Reduziertes Magnetfeld $\frac{B^*}{T^*} := \frac{\alpha}{T^* \varepsilon_u} = \frac{\mu_B g_F B}{T^* \varepsilon_u}$ als Funktion der reduzierten Magnetisierung $M^* = \frac{M}{n \mu_B g_F}$ für Bosonen mit Spin 1, bei fester Temperatur $T^* = 0.38$ (a), $T^* = 0.20$ (b), $T^* = 0.16$ (c), $T^* = 0.12$ (d), $T^* = 0.10$ (e), $T^* = 0.04$ (f). Die gebrochene Linie ($M_C^{A^*}$) markiert den Phasenübergang von antiferromagnetischer (ggf. links) zu ferromagnetischer Phase (rechts), $M_C^{F^*}$ den Phasenübergang von Gasphase (ggf. links) und ferromagnetischer Phase (rechts). Die gebrochene Linie zeigt den analytischen Ausdruck der linearen Näherung. Die Einfügungen zeigen die erste (rot) und zweite (rot, gebrochen) Ableitung von $\frac{B^*}{T^*}$ bezüglich M^* .

Diskussion der inneren magnetischen Suszeptibilität

Abb. 3.12 zeigt das Magnetfeld, als Funktion der Magnetisierung, bei verschiedenen Temperaturen, wie es in einem System homogener $F = 1$ -Spinor-Bosonen wirkt. Die Steigung dieser Kurve stellt die reduzierte innere magnetische Suszeptibilität $\chi_i^* := \frac{\partial M^*(B^*)}{\partial B^*}$ dar, die mit der reduzierten magnetischen Suszeptibilität $\chi^*(H^*) := \frac{\partial M^*(H^*)}{\partial H^*}$ wie folgt zusammenhängt:

$$\chi^*(H) = \frac{\chi^i(B)}{1 - \chi^i(B)} \quad (3.88)$$

Die Abbildungen zeigen bei jeder Temperatur eine Sättigung in der Magnetisierung. Diese tritt bei tiefer Temperatur viel schneller als bei hoher Temperatur ein. Bei hoher Temperatur wird der Unterschied von Bose-Einstein Statistik und klassischer Statistik irrelevant und das Ergebnis für Bosonen konvergiert gegen das eines Maxwell-Boltzmann-Gases (vgl. Abschnitt D). Das Phasendiagramm 3.1 zeigt, dass das System für $M^* = 0$ entweder in der antiferromagnetischen Phase ($T < T_C^0$) oder in der Gasphase ($T < T_C^0$) ist und in allen Fällen $T < T_C^F(M^* = 1)$ (a.-e.) mit steigender Magnetisierung in die ferromagnetische Phase übergeht. In der antiferromagnetischen Phase besteht eine Magnetisierung bei verschwindendem Magnetfeld. Dies ist nicht mit ferromagnetischem Verhalten zu verwechseln: Die Magnetisierung ist in dieser Phase vollständig kondensiert und affiziert den Gasanteil, wie in 3.3.3 diskutiert, nicht. Da die Magnetisierung während der ferromagnetischen Phase kondensiert, ist in dieser die Magnetisierung schneller gesättigt. Abb. 3.12 reflektiert, dass der Einfluss der statistischen Wechselwirkung bei hoher Temperatur irrelevant ist. Die magnetische Suszeptibilität des Bose-Gases konvergiert für $T \rightarrow \infty$ bei jeder Feldstärke gegen die klassischer, magnetischer Momente.

Kapitel 4

Korrelationsfunktionen und Dynamik

In diesem Kapitel wird die Dynamik idealer Spinor Quantengase mithilfe geeigneter Korrelationsfunktionen untersucht. Während die bisherigen thermodynamischen Betrachtungen auf statistische Mittelwerte beschränkt sind, gewährt eine dynamische Betrachtung Einblick in die mikroskopische Natur des Systems.

Was leisten Korrelationsfunktionen? Bei Kenntnis der passenden Green-Funktion kann die Veränderung von Erwartungswerten von Messgrößen durch Störung des thermodynamischen Gleichgewichts angegeben werden. Die allgemeine Störformel gibt die Abweichung des Erwartungswertes der Observablen A eines Systems mit Hamiltonoperator $\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{V}$ und $\hat{V} = 0 \quad \forall t < 0$ zur Zeit t vom Erwartungswert zur selben Zeit in einem durch \hat{H}^0 beschriebenem System, welches sich im thermodynamischen Gleichgewicht befindet an. Mit den Definitionen aus Kapitel A kann sie nach [?, 54] wie folgt geschrieben werden:

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle_t - \langle \hat{A}^D(t) \rangle_0 &= \frac{-i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \langle [\hat{A}^D(t), \hat{V}^D(t')] \rangle \\ &+ \frac{-1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^t dt' \int_0^{t'} dt'' \langle [[\hat{A}^D(t), \hat{V}^D(t')], \hat{V}^D(t'')] \rangle + \dots \end{aligned} \quad (4.1)$$

Dabei können die Operatoren \hat{A} und \hat{V} außerdem eine beliebige explizite Zeitabhängigkeit besitzen. Zusammen mit (A.8) lassen sich also Nicht-Gleichgewichtserwartungswerte durch Gleichgewichtserwartungswerte und retardierte Green-Funktionen (A.2) $G_{A,V}^{\text{ret}}(t, t')$, $G_{[AV],V}^{\text{ret}}(t - t', t'')$, ... ausdrücken. Für den Störoperator $\hat{V} = \hat{B}b(t)$ eines Störfeldes $b(t)$, welches an die Systemobservable B angreift gilt in linearer Näherung der

folgende Ausdruck:

$$\langle \hat{A} \rangle_t - \langle \hat{A}^D(t) \rangle_0 = \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt' b(t') G_{A,B}^{\text{ret}}(t - t') \quad (4.2)$$

Mit der Fourier-Transformierten der Störung $b(E)$ folgt aus (4.2) die Kubo-Formel

$$\langle \hat{A} \rangle_t - \langle \hat{A}^D(t) \rangle_0 \approx \frac{1}{2\pi\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} dE b(E) G_{A,B}^{\text{ret}}(E + i0^+) e^{-\frac{i}{\hbar}(E+i0^+)t} \quad (4.3)$$

Als Systemanteil der Integranden (aller Terme) der allgemeinen Störreihe (4.1) sind Greensche Funktionen in diesem Zusammenhang die entscheidenden Größen.

Auch können fast alle Messgrößen durch geeignete Korrelationsfunktionen ausgedrückt werden [55]. So finden die folgenden Ergebnisse in Kapitel 5 beispielhafte Anwendung zur Berechnung von superfluider Dichte, dynamischem und statischem Strukturfaktor.

Gemäß Abschnitt A.4 existieren einfache Transformationsformeln zwischen Greenschen Funktionen, Korrelationsfunktionen und Spektralfunktionen, weshalb all diese Größen hinsichtlich ihres physikalischen Gehalts äquivalent sind. Im Folgenden erweist sich die Berechnung der Spektralfunktionen als zweckmäßiger Ausgangspunkt. Ferner besteht ein prinzipielles Interesse an den Spektren von Mehrteilchenanregungen, weil die Wahrscheinlichkeit kollektiver Anregungen aufzeigen. Schließlich können die Spektralfunktionen selbst als Messgrößen aufgefasst werden, beschreiben sie doch die aus entsprechenden periodischen Feldern absorbierte Leistung. Besonderes Interesse verdienen die Korrelationsgrößen von Bosonen bei tiefer Temperatur, weil Kohärenz die wesentliche Eigenschaft von BEKen ist und dies sich, als eine mikroskopische Ordnung, natürlich in den Korrelationsgrößen widerspiegelt.

In Kapitel 2 wurden die Spektralfunktionen (2.28) und (2.29) bereits berechnet. In Abschnitt 2.3.2 wurde festgestellt, dass die Form dieser Größe für neutrale und Spinor-Systeme identisch ist. Allein die als Gewichtungsfaktoren auftretenden Verteilungsfunktionen verändern sich. Dies bedeutet, dass qualitative Veränderungen dynamischer Größen, wie des Strukturfaktors, ebenso wie die Nicht-Gleichgewichtsthermodynamik¹ des Systems allein durch Unterschiede der Gleichgewichtsthermodynamik bewirkt werden können. Zunächst werden einleitende Gedanken über Natur und Bedeutung von Anregungsspektren formuliert. Als Hauptaufgabe folgt die Berechnung der Magnetisierungs- und Teilchendichte-Spektralfunktionen, sowie der entsprechenden Strom-Spektralfunktionen, ausgehend von den allgemeinen Ausdrücken (2.51), (2.52), (2.28) und (2.29). Hierbei soll die Frage nach Unterschieden der Teilchendichte- und Stromspektren von neutralen und Spinor-Systemen fokussiert werden.

¹Dies gilt zwar für beliebig starke Störungen des thermodynamischen Gleichgewichts, weil die Greenschen Funktionen den Systemanteil *aller* Terme der allgemeinen Störreihe darstellen, erweist sich jedoch in der Auswertung höchstens für die ersten beiden Ordnungen als praktikabel.

4.1 Anregungsspektren

Welche Information vermitteln Mehrteilchenspektren? Eine Spektralfunktion ist eine Funktion, die die spektrale Verteilung einer Schwingungsenergie beschreibt. Die Teilchendichte-Spektralfunktion $G''_{N_{\mathbf{q}},N_{\mathbf{q}}^+}(E) = G''_{N,N^+}(\mathbf{q}, E)$ ist also ein Maß für die Wahrscheinlichkeit dafür, dass eine Veränderung der Anzahl der Teilchen, die den Impuls $\hbar\mathbf{q}$ haben, eine kollektive Anregung der Energie E bewirkt. Das System hat freilich keinen Unterscheidungssinn zwischen den möglichen Ursachen einer solchen Anregung. Die Funktion $G''_{N,N^+}(\mathbf{q}, E)$ beschreibt deshalb ebenso die Wahrscheinlichkeit dafür, dass eine, durch thermische Fluktuationen bewirkte Dichteoszillation Energie E und Impuls $\hbar\mathbf{q}$ hat, wie die Wahrscheinlichkeit der Entstehung eines solchen Schallquants (Phonon) infolge einer äußeren, den Teilchenzahloperator \hat{N} betreffenden, Störung. Zusammengenommen lässt dies die folgende Interpretation zu: $G''_{N_{\mathbf{q}},N_{\mathbf{q}}^+}(E) = G''_{N,N^+}(\mathbf{q}, E)$ ist ein Maß für die Anzahl der im System vorhandenen kollektiven Teilchendichteerregungen mit Energie E und Impuls $\hbar\mathbf{q}$.

Inwiefern treten Spektralfunktionen als Messgrößen auf? Die von einem Vielteilchensystem aus einem periodischen Störfeld $b(t) = b \cos(\omega t)$, das an der Systemobservable \hat{B} angreift im zeitlichen Mittel absorbierte Leistung, kann durch die Spektralfunktion ausgedrückt werden [56]:

$$\bar{P} = \frac{b^2 \omega \pi}{2\hbar} G''_{BB^+}(\omega) \quad (4.4)$$

Die vom System pro Zeit aufgenommene Energie ist also durch das Quadrat der Feldamplitude und das Produkt aus Störfeldfrequenz und der eben dort ausgewerteten Spektralfunktion gegeben. Die Teilchendichte-Spektralfunktion $G''_{N,N^+}(\mathbf{q}, E)$ ist somit ein Maß für die Energieabsorption aus einem, an die Anzahl der Teilchen mit Impuls $\hbar\mathbf{q}$, angreifenden Störfeld der Frequenz $\omega = \frac{E}{\hbar}$. Dieselbe Information liefert die Magnetisierungs-Spektralfunktion $G''_{M,M}(\mathbf{q}, E)$ für ein, an die Magnetisierung des Systems angreifendes periodisches Störfeld, wie es etwa in Spinresonanzexperimenten (ESR, NMR) auftritt, oder durch ein Photon verwirklicht ist. Teilchen- und Magnetisierungsstrom-Spektralfunktion beschreiben dagegen in analoger Weise die mittlere absorbierte Leistung aus Feldern, die den Teilchen- bzw. Magnetisierungsstromoperator des Systems betreffen.

4.2 Dichte-Spektralfunktionen

4.2.1 Indexverschiebung

Es wird jetzt die Teilchendichte-Spektralfunktion, ausgehend von Gleichung (2.51), berechnet. Mit (2.48) gilt:

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} \delta\left(E - (\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} - \epsilon_{\mathbf{k}\sigma})\right) &= \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} \delta\left(E - \frac{2\mathbf{k}\mathbf{q}\hbar^2 + q^2\hbar^2}{2m}\right) \\ &= \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}\sigma} \delta\left(E + (\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} - \epsilon_{\mathbf{k}\sigma})\right) \end{aligned} \quad (4.5)$$

Im letzten Schritt wurde zuerst $\mathbf{k}' := -(\mathbf{k} + \mathbf{q})$ eingesetzt, anschließend $\sum_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q})}$ durch $\sum_{\mathbf{k}'}$ ersetzt (was möglich ist, weil über alle Wellenzahlen summiert wird) und schließlich die Symmetrie der Verteilungsfunktion (2.49) $n_{-\mathbf{k}\sigma} = n_{+\mathbf{k}\sigma}$ ausgenutzt, sowie die Umbenennung $\mathbf{k} \leftrightarrow \mathbf{k}'$ vorgenommen. Mithilfe von (3.19), (4.5) und der Abkürzung

$$\Delta_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}) := \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} - \epsilon_{\mathbf{k}\sigma} \quad (4.6)$$

lautet (2.51) :

$$G''_{\rho,\rho^+}(E, \mathbf{q}) = n \sum_{\mathbf{k}\sigma} A(\sigma) \left(C_{\mathbf{k}\sigma} \left[\delta(E - \Delta_{\mathbf{k}}(\mathbf{q})) - \delta(E + \Delta_{\mathbf{k}}(\mathbf{q})) \right] \right) \quad (4.7)$$

4.2.2 Berechnung der k-Summe

Es wird jetzt die folgende Summe mit einer beliebigen reell-analytischen Funktion f durch Übergang in den thermodynamischen Limes zweckmäßig umgeformt.

$$S_1 := \sum_{\mathbf{k}\sigma} A(\sigma) C_{\mathbf{k}\sigma} f\left(\Delta_{\mathbf{k}}(\mathbf{q})\right) \quad (4.8)$$

$$S_1 = \sum_{\sigma=-F}^F A(\sigma) \left[C_{\mathbf{0}\sigma} f(\epsilon_{\mathbf{q}}) + \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{0}} f\left(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}}\right) C_{\mathbf{k}\sigma} \right] =: \sum_{\sigma=-F}^F A(\sigma) S_{1,\sigma} \quad (4.9)$$

Darin ist $\epsilon_{\mathbf{k}} := \epsilon_{\mathbf{k}\mathbf{0}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$.

Bei Anwendung der im thermodynamischen Limes exakt gültigen Ersetzung $\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow V \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}$ kann nach Übergang in ein sphärisches Koordinatensystem (mit $\mathbf{e}_z \parallel \mathbf{q}$, so dass

$\mathbf{qk} = qk \cos \theta$ gilt) wieder über den Ursprung hinweg integriert werden, weil der Faktor k^2 den $k = 0$ -Anteil unterdrückt. Zusammen mit (3.19) folgt:

$$S_{1\sigma} = C_{0\sigma} f(\varepsilon_{\mathbf{q}}) + \frac{1}{(2\pi)^3 n_0} \int_0^\infty dk \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{k^2 \sin \theta}{e^{\beta(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu - \alpha\sigma)} - \eta} f\left(2 \cos \theta \sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{q}}} + \varepsilon_{\mathbf{q}}\right) \quad (4.10)$$

Nach Ausführen des trivialen φ Integrals und durch Substitution $\cos \theta \rightarrow \xi$, ergibt sich für den zweiten Summanden zusammen mit der Definition $\xi := \cos \theta$:

$$\frac{1}{(2\pi)^2 n_0} \int_0^\infty dk \int_1^{-1} d\xi \frac{-k^2 \lambda_\sigma}{e^{\beta \frac{\hbar^2 k^2}{2m}} - \eta \lambda_\sigma} f\left(\varepsilon_{\mathbf{q}} + 2\xi \sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{q}}}\right). \quad (4.11)$$

Weitere Substitution $\beta \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \rightarrow x$, (d.h. $k^2 dk \rightarrow \sqrt{2x} \left(\frac{m}{\beta \hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} dx$) ergibt mit (3.24) den Term:

$$\frac{-1}{n \sqrt{\pi} \lambda_T^3} \int_0^\infty dx \frac{-\lambda_\sigma \sqrt{x}}{e^x - \eta \lambda_\sigma} \int_{-1}^1 d\xi f\left(\varepsilon_{\mathbf{q}} + 2\xi \sqrt{\frac{x \varepsilon_{\mathbf{q}}}{\beta}}\right) \quad (4.12)$$

Einsetzen der Identität

$$\frac{1}{e^x - \eta \lambda_\sigma} = \frac{1}{\eta \lambda_\sigma} \frac{d}{dx} \ln \left(1 - \eta \lambda_\sigma e^{-x}\right), \quad (4.13)$$

ergibt nach partieller Integration:

$$\frac{-1}{\eta m \sqrt{\pi} \lambda_T^3} \int_0^\infty dx \ln \left(1 - \eta \lambda_\sigma e^{-x}\right) \left[\frac{1}{2\sqrt{x}} \int_{-1}^1 d\xi f\left(\varepsilon_{\mathbf{q}} + 2\xi \sqrt{\frac{x \varepsilon_{\mathbf{q}}}{\beta}}\right) + \sqrt{x} \int_{-1}^1 d\xi \frac{d}{dx} \left[f\left(\varepsilon_{\mathbf{q}} + 2\xi \sqrt{\frac{x \varepsilon_{\mathbf{q}}}{\beta}}\right) \right] \right]. \quad (4.14)$$

Darin wurde der Randterm bereits weggelassen². Einsetzen von

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} f\left(\varepsilon_{\mathbf{q}} + 2\xi \sqrt{\frac{x \varepsilon_{\mathbf{q}}}{\beta}}\right) &= \left[\frac{d}{d\xi} f\left(\varepsilon_{\mathbf{q}} + 2\xi \sqrt{\frac{x \varepsilon_{\mathbf{q}}}{\beta}}\right) \right] \frac{\frac{d}{dx} f\left(\varepsilon_{\mathbf{q}} + 2\xi \sqrt{\frac{x \varepsilon_{\mathbf{q}}}{\beta}}\right)}{\frac{d\xi}{d\xi} f\left(\varepsilon_{\mathbf{q}} + 2\xi \sqrt{\frac{x \varepsilon_{\mathbf{q}}}{\beta}}\right)} \\ &= \frac{\xi}{2x} \frac{d}{d\xi} f\left(\varepsilon_{\mathbf{q}} + 2\xi \sqrt{\frac{x \varepsilon_{\mathbf{q}}}{\beta}}\right) \end{aligned} \quad (4.15)$$

²Das Verschwinden des Randterms lässt sich durch Umschreiben von $\sqrt{x} \ln \left(1 - \eta \lambda_\sigma e^{-x}\right)$ in $\frac{\ln \left(1 - \eta \lambda_\sigma e^{-x}\right)}{\frac{1}{\sqrt{x}}}$ und $\frac{\sqrt{x}}{\ln \left(1 - \eta \lambda_\sigma e^{-x}\right)}$ nach Anwendung des Satzes von l'Hospital einsehen.

ergibt:

$$\begin{aligned} & \frac{-1}{\eta n \sqrt{\pi} \lambda_T^3} \int_0^\infty dx \ln \left(1 - \eta \lambda_\sigma e^{-x} \right) \\ & \times \left[\frac{1}{2\sqrt{x}} \int_{-1}^1 d\xi f \left(\varepsilon_{\mathbf{q}} + 2\xi \sqrt{\frac{x\varepsilon_{\mathbf{q}}}{\beta}} \right) + \frac{1}{2\sqrt{x}} \int_{-1}^1 d\xi \xi \frac{d}{d\xi} \left[f \left(\varepsilon_{\mathbf{q}} + 2\xi \sqrt{\frac{x\varepsilon_{\mathbf{q}}}{\beta}} \right) \right] \right] \end{aligned} \quad (4.16)$$

Nach partieller Integration im letzten Summanden heben sich die ξ -Integrale auf und es bleibt nur der Randterm bestehen. Damit bleibt:

$$\frac{-1}{2\eta n \sqrt{\pi} \lambda_T^3} \int_0^\infty dx \frac{1}{\sqrt{x}} \ln \left(1 - \eta \lambda_\sigma e^{-x} \right) \left[f \left(\varepsilon_{\mathbf{q}} + 2\sqrt{\frac{x\varepsilon_{\mathbf{q}}}{\beta}} \right) + f \left(\varepsilon_{\mathbf{q}} - 2\sqrt{\frac{x\varepsilon_{\mathbf{q}}}{\beta}} \right) \right] \quad (4.17)$$

Substitution von $x \rightarrow t^2$, anschließende Umbenennung $t \leftrightarrow x$ und Verwendung von:

$$\int_0^\infty dx f(|x|) f \left(\varepsilon_{\mathbf{q}} - \text{const} \cdot x \right) = + \int_{-\infty}^0 dx f(|x|) f \left(\varepsilon_{\mathbf{q}} + \text{const} \cdot x \right) \quad (4.18)$$

führt mit (4.8) und (4.9) auf das Ergebnis:

$$\begin{aligned} & \sum_{\mathbf{k}\sigma} A(\sigma) C_{\mathbf{k},\sigma} f \left(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} - \varepsilon_{\mathbf{k},\sigma} \right) = \\ & \sum_{\sigma=-F}^F A(\sigma) \left[C_{0\sigma} f \left(\varepsilon_{\mathbf{q}} \right) - \frac{1}{\eta n \sqrt{\pi} \lambda_T^3} \int_0^\infty dx \ln \left(1 - \eta \lambda_\sigma e^{-x^2} \right) f \left(\varepsilon_{\mathbf{q}} + 2x \sqrt{\frac{\varepsilon_{\mathbf{q}}}{\beta}} \right) \right] \end{aligned} \quad (4.19)$$

Mit (3.25) gilt schließlich:

$$\begin{aligned} S_1 &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} A(\sigma) C_{\mathbf{k}\sigma} f \left(\Delta_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}) \right) = \sum_{\sigma=-F}^F A(\sigma) \\ & \times \left[C_{0\sigma} f(\varepsilon_{\mathbf{q}}) + \frac{1 - \sum_{\sigma=-F}^F C_{0\sigma}}{\sqrt{\pi} \left(\sum_{\sigma=-F}^F \zeta_{\frac{3}{2}}(\eta \lambda_\sigma) \right)} \int_0^\infty dx \ln \left(1 - \eta \lambda_\sigma e^{-x^2} \right) f \left(\varepsilon_{\mathbf{q}} + 2x \sqrt{\frac{\varepsilon_{\mathbf{q}}}{\beta}} \right) \right] \end{aligned} \quad (4.20)$$

4.2.3 Magnetisierungs- und Teilchendichte-Spektralfunktion

Es wird jetzt (4.20) in (4.7) verwendet. Wähle

$$f \left(\Delta_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}) \right) = n \left[\delta \left(E - \Delta_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}) \right) - \delta \left(E + \Delta_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}) \right) \right] \quad (4.21)$$

Mithilfe des, aus Mittelwertsatz der Analysis, folgenden Ausdruckes

$$\delta(f(x)) = \sum_{x_i} \frac{1}{|f'(x_i)|} \delta(x - x_i) \quad x_i \text{ einfache Nullstelle von } f(x) \quad (4.22)$$

gilt:

$$\delta(E^2 - \varepsilon_{\mathbf{q}}^2) = \frac{1}{2|E|} \left(\delta(E - \varepsilon_{\mathbf{q}}) + \delta(E + \varepsilon_{\mathbf{q}}) \right) \quad (4.23)$$

Mit (E.23) und den Definitionen

$$x := \frac{E}{2} \sqrt{\frac{\beta}{\varepsilon_{\mathbf{q}}}}; \quad y := \frac{\sqrt{\beta \varepsilon_{\mathbf{q}}}}{2} \quad (4.24)$$

folgt durch Einsetzen von (4.20) in (4.7) mit (4.21) das Ergebnis:

$$\begin{aligned} G''_{\rho, \rho^+}(\mathbf{q}, E) &= n \sum_{\sigma=-F}^F A(\sigma) \left[2C_{\mathbf{0}\sigma} E \delta(E^2 - \varepsilon_{\mathbf{q}}^2) \right. \\ &\quad \left. + \frac{\beta}{4y\sqrt{\pi}} \left(\frac{1 - \sum_{\sigma=-F}^F C_{\mathbf{0}\sigma}}{\sum_{\sigma=-F}^F \zeta_{\frac{3}{2}}(\eta\lambda_{\sigma})} \right) \left(\zeta_1(\eta\lambda_{\sigma} e^{-(x-y)^2}) - \zeta_1(\eta\lambda_{\sigma} e^{-(x+y)^2}) \right) \right] \end{aligned} \quad (4.25)$$

oder, speziell für die Dichte-Dichte-Spektralfunktion mit $A(\sigma) = 1$, ausgeschrieben:

$$\begin{aligned} G''_{\rho, \rho^+}(\mathbf{q}, E, T) &= n \left[2(C_{\mathbf{0}, \mathbf{F}} + 2FC'_{\mathbf{0}}) E \delta(E^2 - \varepsilon_{\mathbf{q}}^2) \right. \\ &\quad + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\beta}{\varepsilon_{\mathbf{q}} \pi}} [1 - C_{\mathbf{0}, \mathbf{F}} - 2FC'_{\mathbf{0}}] \\ &\quad \times \left. \frac{\sum_{\sigma=-F}^F \left[\zeta_1 \left(\eta e^{\frac{\mu+\alpha\sigma}{k_B T}} e^{-\frac{(E-\varepsilon_{\mathbf{q}})^2}{4\varepsilon_{\mathbf{q}} k_B T}} \right) - \zeta_1 \left(\eta e^{\frac{\mu+\alpha\sigma}{k_B T}} e^{-\frac{(E+\varepsilon_{\mathbf{q}})^2}{4\varepsilon_{\mathbf{q}} k_B T}} \right) \right]}{\sum_{\sigma=-F}^F \zeta_{\frac{3}{2}} \left(\eta e^{\frac{\mu+\alpha\sigma}{k_B T}} \right)} \right] \end{aligned} \quad (4.26)$$

Darin beschreibt der erste Summand den Kondensatbeitrag zur Teilchendichte-Spektralfunktion, während der zweite Summand den thermischen Beitrag wiedergibt. Offensichtlich ist die Spektralfunktion (4.26) eine ungerade Funktion in der Energie. Es genügt deshalb sie im positiven Bereich abzubilden.

4.2.4 Diskussion

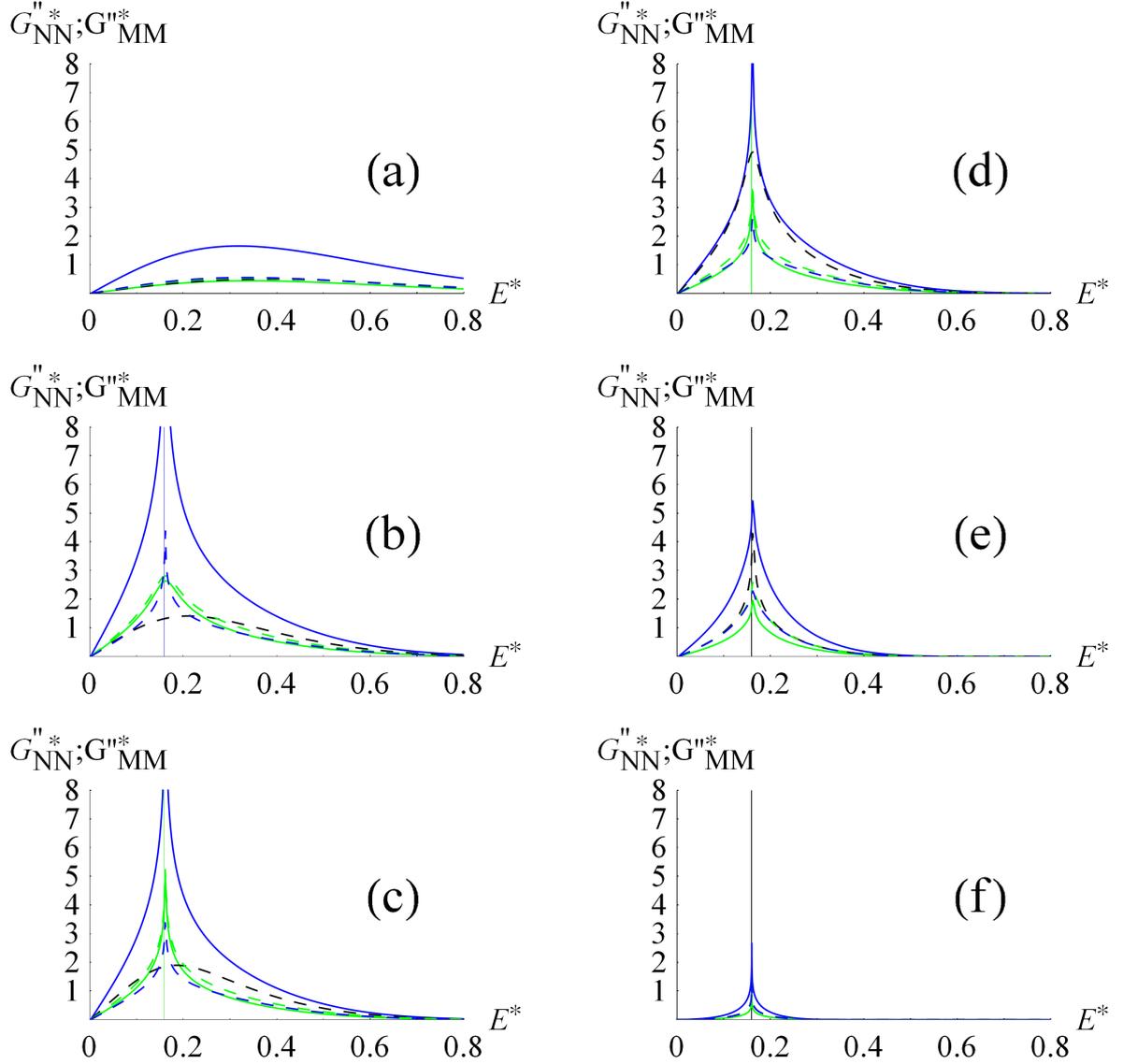


Abbildung 4.1: Energieabhängige Teilchenzahl-Spektralfunktion $G''_{NN+} := \frac{\varepsilon_u}{n} G''_{N,N+}$ für Bosonen bei fester Magnetisierung $\frac{M}{M_{\max}} = 0$ (schwarz gebrochen), Bosonen bei $\frac{M}{M_{\max}} = 0.7$ mit Spin 1 (grün gebrochen) und Spin 2 (blau gebrochen), fester Anregungswellenzahl $q^* = 0.4$ und fester Temperatur $T^* = 0.491(a)$, $0.200(b)$, $0.164(c)$, $0.114(d)$, $0.0513(e)$, $0.0220(f)$. Energieabhängige Magnetisierungs-Spektralfunktion $G''_{M^z M^z+} := \frac{\varepsilon_u V^2}{n g_F^2 \mu_B^2} G''_{M^z, M^z+}$ bei $\frac{M}{M_{\max}} = 0.7$, für Bosonen mit Spin 1 (grün) und Bosonen mit Spin 2 (blau), bei selber Anregungswellenzahl und Temperatur.

Phasenübersicht für Bosonen mit Spin $F = 1$						
T^*	0.0220	0.0513	0.114	0.164	0.200	0.491
T/T_C	0.200	0.471	1.05	1.50	1.83	4.50
$T/T_C^A(M^* = 0.7)$	0.450	1.05	2.15	3.36	0.409	10.1
$T/T_C^F(M^* = 0.7)$	0.116	0.270	0.600	0.863	1.05	2.58
$M^* = 0$	AF	AF	G	G	G	G
$M^* = 0.7$	AF	F	F	F	G	G
Phase: AF: antiferromagnetische; F: ferromagnetische; G: Gasphase						
$T_C^0 = 0.1090$ $T_C^F(M^* = 0.7) = 0.1901$ $T_C^A(M^* = 0.7) = 0.4885$						

Die Abbildungen zeigen die exakte Magnetisierungs- und Teilchendichte-Spektralfunktion (neutraler und) magnetisierter, homogener Bosonengase als Funktion der Anregungsenergie E^* , bei fester Wellenzahl $q^* = 0, 4$ und verschiedenen festen Temperaturen.

Diskussion der Teilchendichte-Spektralfunktion

Es werden zuerst die physikalischen Ursachen der Form des Teilchendichte-Anregungsspektrums neutraler Bosonen diskutiert und anschließend die Veränderungen, welche die Magnetisierung hervorruft.

Je höher die Temperatur ist, desto mehr hochfrequente, thermische Dichtefluktuationen liegen im System vor und das thermische Maximum des Spektrums liegt bei entsprechend hoher Energie. Sobald Kondensation einsetzt, bildet sich ein Delta-Peak im Spektrum aus, dessen Gewicht proportional zur Kondensatdichte ist. Formal ist dies aus (4.26) mit

$$\sum_{\sigma=-F}^F C_{0\sigma} = 1 \text{ für } T = 0 \text{ sofort ersichtlich.}$$

Warum ist der Kondensatanteil durch einen Delta-Peak im Dichte-Anregungsspektrum repräsentiert? Infolge der Kohärenz des Kondensatanteils, können keine weiteren Dichtefluktuationen im Kondensat vorhanden sein. Die Energie einer das Kondensat betreffenden, Dichtestörung ist folglich allein durch die Energie $E = (q^*)^2 = 0.16$ der Störung gegeben. Anders ausgedrückt, können nur Phononen mit quadratischer Dispersionsrelation angeregt werden.

Eine Betrachtung der Teilchendichte-Green Funktion bei $T = 0$ verdeutlicht dies. Die Pole dieser Größe geben die möglichen elementaren Anregungsenergien einer Teilchendichtemode an. Aus $\sum_{\sigma=-F}^F C_{0\sigma} = 1$, (4.26), (4.23) und (A.37) folgt für $T = 0$:

$$G_{N,N+}^{\text{ret}}(\mathbf{q}, E) = n \left(\frac{1}{E + \varepsilon_{\mathbf{q}} + i0^+} + \frac{1}{E - \varepsilon_{\mathbf{q}} - i0^+} \right) \quad (4.27)$$

Offensichtlich überträgt sich die Einteilchendispersion der Teilchen auf Phononen des Kon-

densatanteils. Das BEK verhält sich in dieser Hinsicht wie ein einzelnes Atom. Es können nur Dichteoszillationen (Schallwellen) mit quadratischer Dispersion vorhanden sein oder entstehen. In wechselwirkenden Systemen ist dagegen die Einteilchen-Dispersionsrelation $\varepsilon(\mathbf{k})$ für kleine Wellenzahlen \mathbf{k} linear³ und es ergäbe sich vermutlich die übliche lineare Dispersion für die Phononen.

Desweiteren ist zu bemerken, dass Kondensatanteil und thermischer Anteil als separate Summanden im Spektrum auftreten. Dies bedeutet, dass das Spektrum in zwei unabhängige, sich nicht gegenseitig beeinflussende Teile zerfällt. Konsequenterweise haben thermische Fluktuationen keine Auswirkungen auf den Kondensatanteil.

Im Kondensationsbereich bildet auch der thermische Anteil einen Peak aus, was den Schluss zulässt, dass für hinreichend tiefe Temperatur auch innerhalb der thermischen Wolke ein kohärenzähnlicher Zustand entsteht, d.h. dass sich die Phasenbeziehung zwischen den angeregten Zuständen mit abnehmender Temperatur immer langsamer verändert.

Besondere Beachtung gebührt der Existenz einer Vorstufe des thermischen Peaks kurz oberhalb der Kondensation (vgl. Abb. 4.1 b für Spinor-Bosonen und d für spinentartete Bosonen). Dies reflektiert die Vorbereitung der mikroskopischen Ordnung in Form einer qualitativen Zunahme von Phononen mit quadratischer Dispersionsrelation.

Ein qualitativer Unterschied zwischen neutralen und Spinor-Bosonen besteht nur in einem mittleren Temperaturbereich, wenn für letztere die ferromagnetische Phase vorliegt, während im entsprechenden Temperaturbereich für erstere die Gasphase gegeben ist. (vgl. Abb. 4.1 b und c) Die frühere Ausbildung des Peaks für Spinor-Bosonen liegt also im Anstieg der kritischen Temperatur mit der Magnetisierung begründet. Neben der makroskopischen Gewichtung des $k = 0$ -Zustands, vermitteln sich Veränderungen der Gleichgewichts-Thermodynamik über das, durch die Gross-Pitaevskii-Gleichungen erzwungene, Abhängigkeitsverhältnis von chemischem Potential und Magnetfeld dem thermischen Anteil, was dessen qualitative Veränderung an den Phasengrenzen bewirkt. Dies reflektiert die eingangs formulierte Erwartung, dass sich qualitative Veränderungen der Gleichgewichtsthermodynamik einerseits auf die Dynamik übertragen und andererseits, infolge der formalen Invarianz⁴ der betrachteten Spektralfunktionen gegenüber der Existenz eines (induzierten) Magnetfeldes, als einzige Ursache einer qualitativen Veränderung in Betracht kommt. (In Abb. 4.1 b liegt für Bosonen mit Spin 2 bereits ein Kondensat vor, für Bosonen mit Spin 1 bereitet sich eine mikroskopische Ordnung vor und neutrale Bosonen befinden sich noch mitten in der Gasphase). Die Veränderungen bei hoher Temperatur sind dagegen quantitativ. In der antiferromagnetischen Phase unterscheiden sich die Resultate für Spinor-Bosonen überhaupt nicht mehr von denen des neutralen Systems,

³Nur in diesem Bereich sind die niederenergetischen kollektiven Anregungen dominant gegenüber Einteilchenanregungen

⁴Dies bedeutet, dass der Zeeman-Term keinen Einfluss auf die Phononendispersion hat.

weil dort $\alpha = 0$ gilt und damit kein Magnetfeld mehr vorliegt.

Zusammenfassend ausgedrückt unterscheiden sich die Teilchendichte-Anregungsspektren von neutralen Bosonen und Spinor-Bosonen für tiefe Temperaturen überhaupt nicht, für hohe Temperaturen quantitativ und in einem mittleren Temperaturbereich qualitativ.

Magnetisierungs-Spektralfunktion

Die formalen Ausdrücke von Teilchen- und Magnetisierungs-Spektralfunktion unterscheiden sich allein durch zusätzliche Gewichtung der einzelnen Spinzustände mit dem Faktor $\frac{g_F^2 \mu_B^2}{V^2} \sigma^2$ in Letzterer. Die Form des Magnetisierungsspektrums hat folglich analoge physikalischen Ursachen, wie die des Teilchendichtespektrums.

Dies hat eine interessante Konsequenz: Es wurde festgestellt, dass die Ausbildung des Delta-Peaks die Kohärenz der Atomzustände bzw. die Unmöglichkeit von Dichtefluktuation im Kondensatanteil reflektiert. Der Auftritt eines Delta-Peaks im Magnetisierungsspektrum bedeutet damit die Unmöglichkeit von Magnetisierungsfluktuationen im Kondensat. Der Kondensatanteil der Magnetisierung reagiert folglich auch nicht auf eine Störung derselben durch ein Feld. (Die Energie einer Magnetisierungsstörung im Kondensat ist allein durch die der Störung gegeben.) Damit ist die Tatsache, dass kondensierte magnetische Momente, selbst in paralleler Ausrichtung keinen messbaren Beitrag zum induzierten Magnetfeld leisten und der Meißner-Effekt auftritt, auf die Eigenschaft der Kohärenz zurückgeführt (Im Rahmen der thermodynamischen Betrachtung in Abschnitt 3.3.3 musste dies noch als erstaunliches Faktum hingenommen werden).

Im Falle von Spin $F = 1$ Bosonen, bewirkt der σ^2 -Faktor nichts als die Unterdrückung des Beitrages der Atome im Spin $m_z = 0$ -Zustand. Für $F = 2$ werden dagegen die Atome im Zustand $m_z = \pm 2$ vierfach so stark wie im Teilchendichtespektrum gewichtet, was zur starken F -Abhängigkeit des Magnetisierungsspektrums führt.

4.3 Strom-Spektralfunktionen

Es folgt die Berechnung der Teilchen- und Magnetisierungsstrom-Spektralfunktion.

4.3.1 Zerlegung in longitudinalen und transversalen Anteil

In räumlich homogenen, isotropen Systemen, wie dem Vorliegenden haben Strom-Spektralfunktion nur zwei unabhängige Komponenten, die durch folgende Gleichung be-

stimmt sind:

$$G''_{J',J'+}(E, \mathbf{q}) = G''_{J,J+}{}^{\parallel}(\mathbf{q}, E) \frac{q_l q_{l'}}{q^2} + G''_{J,J+}{}^{\perp}(\mathbf{q}, E) \left(\delta_{l,l'} - \frac{q_l q_{l'}}{q^2} \right) \quad (4.28)$$

Durch Erweiterung mit $\frac{q_l q_{l'}}{q^2}$ und anschließender Summation über l und l' folgt:

$$G''_{J,J+}{}^{\parallel}(\mathbf{q}, E) = \sum_{l,l'} \frac{q_l q_{l'}}{q^2} G''_{J',J'+}(\mathbf{q}, E) \quad (4.29)$$

Einsetzen von (2.52) in (4.29) liefert mit (3.19):

$$G''_{J,J+}{}^{\parallel}(\mathbf{q}, E) = \frac{nV\hbar^3}{m^2} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left[(C_{\mathbf{k},\sigma} - C_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}) \times \delta(E - \Delta_{\mathbf{k}}(\mathbf{q})) \sum_{l,l'} \left(\frac{q_l q_{l'}}{q^2} \right) \left(k_l + \frac{q_l}{2} \right) \left(k_{l'} + \frac{q_{l'}}{2} \right) \right] \quad (4.30)$$

Mit

$$\sum_{l,l'} \frac{q_l q_{l'}}{q^2} \left(k_l + \frac{q_l}{2} \right) \left(k_{l'} + \frac{q_{l'}}{2} \right) = \frac{(2\mathbf{q}\mathbf{k} + q^2)^2}{4q^2} \quad (4.31)$$

und der Tatsache, dass die Delta Funktion nur an der Stelle

$$E = \Delta_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}) = \frac{(2\mathbf{q}\mathbf{k} + q^2)\hbar^2}{2m} \longrightarrow (2\mathbf{k} + \mathbf{q}) = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (4.32)$$

nicht verschwindet, kann in (4.30) folgende Ersetzung vorgenommen werden:

$$\sum_{l,l'} \frac{q_l q_{l'}}{q^2} \left(k_l + \frac{q_l}{2} \right) \left(k_{l'} + \frac{q_{l'}}{2} \right) \longrightarrow \frac{(2mE)^2}{4q^2\hbar^4} \quad (4.33)$$

Nach Verwendung von (4.5) mit (3.19) lautet (4.30):

$$G''_{J,J+}{}^{\parallel}(\mathbf{q}, E) = n \frac{E^2}{\hbar^2 q^2} \sum_{\mathbf{k}\sigma} C_{\mathbf{k},\sigma} \left[\delta(E - \Delta_{\mathbf{q}}(\mathbf{q})) - \delta(E + \Delta_{\mathbf{q}}(\mathbf{q})) \right] \quad (4.34)$$

Der Vergleich von (4.34) und (4.7) ergibt:

$$G''_{J,J+}{}^{\parallel}(\mathbf{q}, E) = \frac{E^2}{\hbar^2 q^2} G''_{N,N+}(\mathbf{q}, E) \quad (4.35)$$

Mithilfe von

$$\sum_{l,l'} \frac{q_l q_{l'}}{q^2} \left(\delta_{l,l'} - \frac{q_l q_{l'}}{q^2} \right) = \sum_l \frac{q_l}{q^2} - \sum_{l,l'} \frac{q_l q_{l'}}{q^2} = 0 \quad (4.36)$$

gilt mit (4.28):

$$\begin{aligned}
 \sum_{l,l'} \left(\delta_{l,l'} - \frac{q_l q_{l'}}{q^2} \right) G''_{J_l, J_{l'}^+}(\mathbf{q}, E) &= \sum_{l,l'} \left(\delta_{l,l'} - \frac{q_l q_{l'}}{q^2} \right)^2 G''_{J, J^+}(\mathbf{q}, E) \\
 &= \sum_{l,l'} \left[\delta_{l,l'} \left(\delta_{l,l'} - \frac{q_l q_{l'}}{q^2} \right) - \frac{q_l q_{l'}}{q^2} \left(\delta_{l,l'} - \frac{q_l q_{l'}}{q^2} \right) \right] G''_{J_{\mathbf{q}}, J_{\mathbf{q}}^+}(\mathbf{q}, E) \\
 &= 2G''_{J, J^+}(\mathbf{q}, E)
 \end{aligned} \tag{4.37}$$

Daraus folgt:

$$G''_{J, J^+}(\mathbf{q}, E) = \frac{1}{2} \sum_{l,l'} \left(\delta_{l,l'} - \frac{q_l q_{l'}}{q^2} \right) G''_{J_l, J_{l'}^+}(\mathbf{q}, E) \tag{4.38}$$

Einsetzen von (2.52) in (4.38) ergibt mit (3.19):

$$\begin{aligned}
 G''_{J, J^+}(\mathbf{q}, E) &= \frac{n\hbar^2}{2m^2} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left[\left(C_{\mathbf{k},\sigma} - C_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} \right) \delta(E - \Delta_{\mathbf{k}}(\mathbf{q})) \right. \\
 &\quad \left. \times \sum_{l,l'} \left(\delta_{l,l'} - \frac{q_l q_{l'}}{q^2} \right) \left(k_l + \frac{q_l}{2} \right) \left(k_{l'} + \frac{q_{l'}}{2} \right) \right]
 \end{aligned} \tag{4.39}$$

Mit

$$\sum_{l,l'} \left(\delta_{l,l'} - \frac{q_l q_{l'}}{q^2} \right) \left(k_l + \frac{q_l}{2} \right) \left(k_{l'} + \frac{q_{l'}}{2} \right) = k^2 - \frac{(\mathbf{k}\mathbf{q})^2}{q^2} =: k^2(1 - \xi^2) \tag{4.40}$$

vereinfacht sich (4.39) nach Verwendung von (4.5) mit (3.19) weiter zu:

$$G''_{J, J^+}(\mathbf{q}, E) = \frac{n\hbar^2}{2m^2} \sum_{\mathbf{k},\sigma} A(\sigma) C_{\mathbf{k}\sigma} k^2 (1 - \xi^2) \left[\delta(E - \Delta_{\mathbf{k}}(\mathbf{q})) - \delta(E + \Delta_{\mathbf{k}}(\mathbf{q})) \right] \tag{4.41}$$

4.3.2 Berechnung der k-Summe

Es ist jetzt die Summe

$$S_2 := \sum_{\mathbf{k}\sigma} A(\sigma) k^2 (1 - \xi^2) C_{\mathbf{k}\sigma} f(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} - \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}) =: \sum_{\sigma=-F}^F A(\sigma) S_{2,\sigma} \tag{4.42}$$

zu berechnen. Analoges Vorgehen wie beim Übergang von (4.9) nach (4.11) führt auf

$$S_{2,\sigma} = \frac{4\sqrt{\pi}\lambda_\sigma}{n\lambda_T^5} \int_0^\infty dx \int_{-1}^1 d\xi (1 - \xi^2) \frac{x^{\frac{3}{2}}}{e^x - \eta\lambda_\sigma} f\left(\varepsilon_{\mathbf{q}} + 2\xi\sqrt{\frac{x\varepsilon_{\mathbf{q}}}{\beta}}\right) \tag{4.43}$$

Erneute Verwendung der Identität (4.13) ergibt nach partieller Integration in x , mit (4.15) (wobei wie in Abschnitt (4.2.2) der Randterm verschwindet):

$$S_{2,\sigma} = \frac{-4\sqrt{\pi}}{n\eta\lambda_T^5} \int_0^\infty dx \ln \left(1 - \eta\lambda_\sigma e^{-x} \right) \times \left[\frac{3}{2} \sqrt{x} \int_{-1}^1 d\xi (1 - \xi^2) f \left(\varepsilon_q + 2\xi \sqrt{\frac{x\varepsilon_q}{\beta}} \right) + \frac{1}{2} \sqrt{x} \int_{-1}^1 d\xi \xi (1 - \xi^2) \frac{df \left(\varepsilon_q + 2\xi \sqrt{\frac{x\varepsilon_q}{\beta}} \right)}{d\xi} \right] \quad (4.44)$$

Nach partieller Integration des ξ -Integrals im letzten Summanden, verschwindet der Randterm und es ergibt sich:

$$S_{2,\sigma} = \frac{-4\sqrt{\pi}}{n\eta\lambda_T^5} \int_0^\infty dx \ln \left(1 - \eta\lambda_\sigma e^{-x} \right) \left[\sqrt{x} \int_{-1}^1 d\xi f \left(\varepsilon_q + 2\xi \sqrt{\frac{x\varepsilon_q}{\beta}} \right) \right] \quad (4.45)$$

Mit der unbestimmter Stammfunktion $F(x) = \int dx f(x)$ zur Funktion f , folgt nach Ausführen des ξ -Integrals

$$\frac{-4\sqrt{\pi}}{n\eta\lambda_T^5} \left(\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\beta}{\varepsilon_q}} \right) \int_0^\infty dx \ln \left(1 - \eta\lambda_\sigma e^{-x} \right) \left[F \left(\varepsilon_q + 2\sqrt{\frac{x\varepsilon_q}{\beta}} \right) - F \left(\varepsilon_q - 2\sqrt{\frac{x\varepsilon_q}{\beta}} \right) \right] \quad (4.46)$$

Schließlich resultiert durch Substitution von x durch t^2 , anschließender Umbenennung $t \leftrightarrow x$ und Verwendung von $\int_0^\infty dx x f(|x|) f(\varepsilon_q - \text{const} \cdot x) = - \int_{-\infty}^0 dx x f(|x|) f(\varepsilon_q + \text{const} \cdot x)$:

$$S_{2,\sigma} = \frac{-8\pi\beta}{n\eta q \lambda_T^6} \int_{-\infty}^\infty dx x \ln \left(1 - \eta\lambda_\sigma e^{-x^2} \right) F \left(\varepsilon_q + 2\sqrt{\frac{x\varepsilon_q}{\beta}} \right) \quad (4.47)$$

Rückeinsetzen in (4.42) ergibt mit (3.25):

$$\begin{aligned} S_2 &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} A(\sigma) k^2 (1 - \xi^2) C_{\mathbf{k},\sigma} f \left(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} - \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} \right) \\ &= \sum_{\sigma=-F}^F A(\sigma) \left[\frac{-8\pi\beta}{q\lambda_T^3} \left[\frac{1 - \sum_{\sigma=-F}^F C_{0\sigma}}{\sum_{\sigma=-F}^F \zeta_{\frac{3}{2}}(\eta\lambda_\sigma)} \right] \int_{-\infty}^\infty dx x \ln \left(1 - \eta\lambda_\sigma e^{-x^2} \right) \right. \\ &\quad \left. \times F \left(\varepsilon_{\mathbf{q}} + 2x \sqrt{\frac{\varepsilon_{\mathbf{q}}}{\beta}} \right) \right] \end{aligned} \quad (4.48)$$

4.3.3 Longitudinale Strom-Spektralfunktionen

Mit(4.35) folgt unmittelbar:

$$G''''_{J_{\mathbf{q}}, J_{\mathbf{q}}^+}(E, \mathbf{q}) = \frac{E^2}{\hbar^2 q^2} G''_{\rho_{\mathbf{q}}, \rho_{\mathbf{q}}^+}(E, \mathbf{q}) \quad (4.49)$$

4.3.4 Transversale Strom-Spektralfunktionen

Gemäß (E.25) gilt:

$$\zeta_2(\alpha e^{-x^2}) = - \int_0^{\alpha e^{-x^2}} dt \frac{\ln(1-t)}{t} \quad (4.50)$$

Substitution von $t \rightarrow \alpha e^{-x^2}$ liefert:

$$\zeta_2(\alpha e^{-x^2}) = 2 \int_{-\infty}^x dx' \cdot x' \ln(1 - \alpha e^{-x'^2}) \quad (4.51)$$

Einsetzen von (4.48) in (4.41) liefert nach Vertauschung von x -Integration und Stammfunktionbildung und anschließendem Einsetzen von (4.51) das folgende Ergebnis:

$$G''_{J, J^+}{}^{\perp}(E, q, T) = \frac{n}{2m\sqrt{\varepsilon_{\mathbf{q}}}\beta\pi} \left[1 - C_{\mathbf{0F}} - 2F \cdot C_{\mathbf{0}} \right] \\ \times \frac{\sum_{\sigma=-F}^F A(\sigma) \left(\zeta_2 \left(\eta e^{\frac{\mu+\alpha\sigma}{k_B T}} e^{-\frac{(E-\varepsilon_{\mathbf{q}})^2}{4k_B T \varepsilon_{\mathbf{q}}}} \right) - \zeta_2 \left(\eta e^{\frac{\mu+\alpha\sigma}{k_B T}} e^{-\frac{(E+\varepsilon_{\mathbf{q}})^2}{4k_B T \varepsilon_{\mathbf{q}}}} \right) \right)}{\sum_{\sigma=-F}^F \zeta_{\frac{3}{2}} \left(\eta e^{\frac{\mu+\alpha\sigma}{k_B T}} \right)} \quad (4.52)$$

Mit (4.21) und (4.24) lässt sich (4.52) noch in die folgende, später benötigte, Form

umschreiben:

$$\begin{aligned}
 G''_{J,J^+}(\mathbf{q}, E) &= \frac{n}{4ym\sqrt{\pi}} \left(\frac{1 - \sum_{\sigma=-F}^F C_{0\sigma}}{\sum_{\sigma=-F}^F \zeta_{\frac{3}{2}}(\eta\lambda_\sigma)} \right) \\
 &\times \left(\sum_{\sigma=-F}^F A(\sigma) \left[\zeta_2(\eta\lambda_\sigma e^{-(x-y)^2}) - \zeta_2(\eta\lambda_\sigma e^{-(x+y)^2}) \right] \right) \quad (4.53)
 \end{aligned}$$

Diese Größen haben offensichtlich die Dimension von $\frac{n}{m}$, weshalb $G''_{J,J^+}(E, q, T) := \frac{2m}{n} G''_{J,J^+}(E, q, T)$ aufgetragen wird. Da (4.26) eine ungerade Funktion in E ist, ist dies auch (4.49). Offensichtlich ist auch (4.52) eine ungerade Funktion. Es genügt deshalb wieder den positiven Bereich des Spektrums abzubilden: Da sich die formalen Ausdrücke zwischen Magnetisierungsstrom- und Teilchenstromdichte-Spektralfunktion wie im Falle der Dichte-Spektralfunktionen nur um den Gewichtungsfaktor $\frac{g_F^2 \mu_B^2}{V^2} \sigma^2$ unterscheiden, bleibt die folgende Diskussion auf erstere beschränkt.

4.3.5 Diskussion

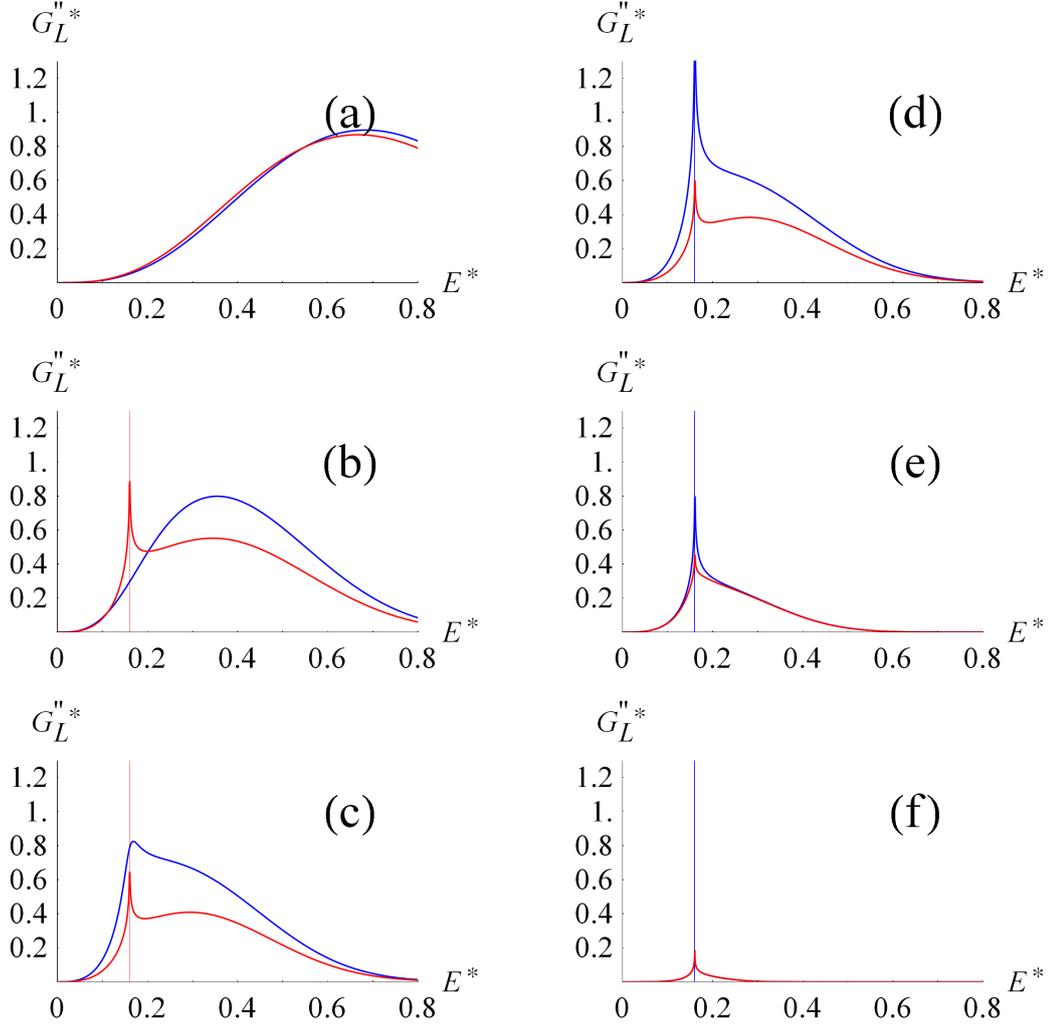


Abbildung 4.2: Energieabhängige longitudinale Teilchenstrom-Spektralfunktion $G_{JJ+}''^* := \frac{2m}{n} G_{JJ+}''^*$ von spinentarteten Bosonen (blau) und Bosonen mit Spin 1 bei fester Magnetisierung $\frac{M}{M^{\text{ast}}} = 0.7$ (rot), bei fester Anregungswellenzahl $q^* = 0.4$ und fester Temperatur $T^* = 0.491(a), 0.164(b), 0.114(c), 0.104(d), 0.055(e), 0.011(f)$.

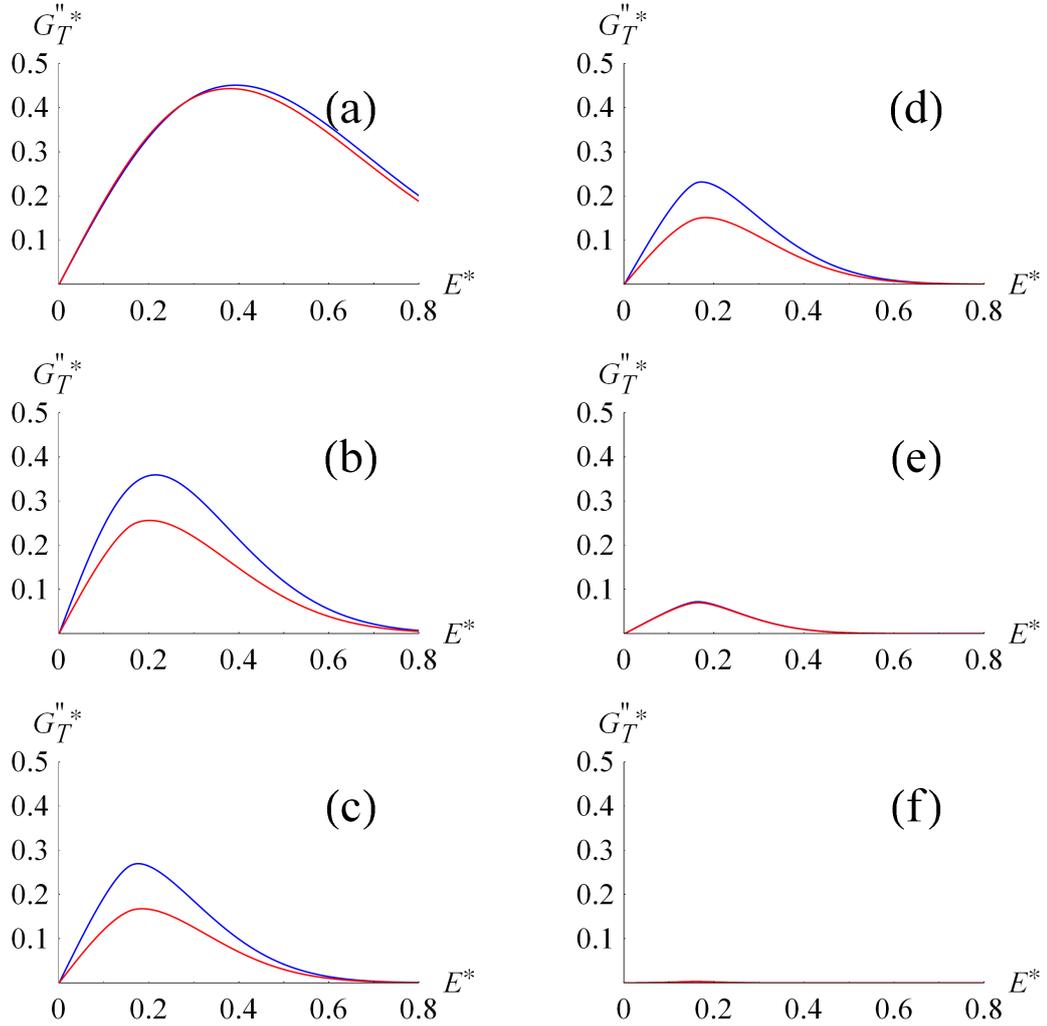


Abbildung 4.3: Energieabhängige Transversale Teilchenstrom-Spektralfunktion $G_{JJ_+}''^{\perp*} := \frac{2m}{n} G_{JJ_+}''^{\perp}$ für spinentartete (blau) und Spin 1-Bosonen (rot). Parameter wie in Abb. 4.2.

Die Abbildungen zeigen den longitudinalen und den transversalen Anteil des Teilchenstrom-Anregungsspektrums bei festem Anregungsimpuls als Funktion der Anregungsenergie bei verschiedenen Temperaturen, für neutrale und Spinor-Bosonen. Die Ergebnisse reproduzieren im Fall spinentarteter Bosonen, mit $M^* \rightarrow 0$, die entsprechenden Ergebnisse auf Ref. [34].

Wie die Teilchendichte-Spektralfunktion (2.15) ist auch die Teilchenstrom-Spektralfunktion (2.20) formal invariant gegenüber der Existenz einer Magnetisierung. Die Ursachen des quantitativen Unterschiedes der Anregungsspektren von neutralen Bosonen und Spinor-Bosonen bei hoher Temperaturen, sind deshalb ebenso wie die Gleichheit dieser Spektren bei tiefer Temperatur, wesentlich die in Abschnitt (4.2.4) ausgeführten.

Im mittleren Temperaturbereich besteht dagegen erneut ein qualitativer Unterschied der Spektren, der natürlich wieder von Unterschieden in der Gleichgewichtsthermodynamik herrührt. In Abb. 4.3 ist dies allerdings im Unterschied zu Abb. 4.2 nicht sofort erkennbar, weil der Kondensatanteil keinen Beitrag zur transversalen Strom-Spektralfunktion leistet:

Der Faktor k^2 in (4.41) unterdrückt den Kondensatanteil jedes Spinzustandes. Für Temperaturen $T < T_C^F$ nimmt deshalb das transversale Impulsanregungsspektrum schnell ab. Für $T = 0$ verschwindet es ganz, was mit $\sum_{\sigma=-F}^F C_{0\sigma} = 1$ für $T = 0$ sofort aus (4.52) ersichtlich ist. Dann ist die Energieabsorption aus einem transversal angreifenden periodischen Störfeld, welches den Teilchen- oder Magnetisierungsstromoperator betrifft, unmöglich.

Deutlich zu beobachten ist, dass das Maximum des transversalen Impulsanregungsspektrums von Spinor-Bosonen im mittleren Temperaturbereich deutlich unterhalb desselben neutraler Bosonen liegt. Die Ursache hierfür liegt erneut in der Gleichgewichtsthermodynamik begründet: die Kondensationstemperatur von Spinor-Bosonen steigt mit der Magnetisierung an, weshalb für alle Temperaturen $T < T_C^F$ mehr Teilchen kondensiert sind, als im neutralen System. Es verbleiben deshalb weniger thermisch angeregte Teilchen, die zum Spektrum beitragen.

Der Ausdruck (4.49) zeigt, dass das longitudinale Impulsanregungsspektrum sich vom Teilchendichteanregungsspektrum nur durch den Faktor $\frac{E^2}{\hbar^2 q^2}$ unterscheidet. Dieser bewirkt eine Betonung des hochenergetischen Bereiches. Physikalisch bedeutet der Zusammenhang, dass die Absorptionswahrscheinlichkeit eines Anregungsquants aus einem Feld, welches longitudinal an den Teilchenimpuls angreift, um den Faktor $\frac{E^2}{\hbar^2 q^2}$ gegenüber einem Feld, welches an der Teilchendichte angreift, erhöht ist.

4.4 Statische Suszeptibilitäten

Die verallgemeinerte (dynamische) Suszeptibilität (lat. susceptibilitas = „Übernahmefähigkeit“) ist durch die Fourier-Transformierte der retardierten Green-Funktion gegeben. Wie die magnetische Suszeptibilität den Einfluss eines Magnetfeldes auf die Magnetisierung beschreibt, gibt die verallgemeinerte Suszeptibilität $G_{A,B}^{\text{ret}}(E)$ die Abweichung $\delta A_t = \langle \hat{A} \rangle_t - \langle \hat{A} \rangle$ des Erwartungswertes der Observablen \hat{A} zur Zeit t von ihrem Erwartungswert $\langle \hat{A} \rangle$ im thermodynamischen Gleichgewicht an, wenn ein schwaches Störfeld $b(E)$ seit $t = 0$ an die Systemobservable \hat{B} angreift.

Mithilfe der Fourier Transformierten der A-Fluktuation $\delta A_\omega = \int_{-\infty}^{\infty} \delta A_t e^{\frac{i}{\hbar} E t}$ kann (4.3) in

folgende Form geschrieben werden:

$$\delta A_E = \frac{1}{\hbar} b(E) G_{AB}^{\text{ret}}(E + i0^+) \quad (4.54)$$

Die sogenannte statische Suszeptibilität ist durch $G_{A,B}^{\text{ret}}(q) := \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dE G_{A,B}^{\text{ret}}(E, q)$ gegeben. Nach (A.37) gilt

$$\begin{aligned} G^{\text{ret}}(q) &= G^{\text{ret}}(0, q) = \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dE' \frac{G''_{A,B}(E', q)}{-E' + i0^+} \\ &= \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dE' \frac{G''_{A,B}(-E', q)}{E' + i0^+} = \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{G'''(E)}{E + i0^+} \end{aligned} \quad (4.55)$$

wobei im letzten Schritt die Antisymmetrie der Spektralfunktionen ausgenutzt wurde.

Was leistet die statische Suszeptibilität? Im Falle einer kleinen, konstanten Störung $b(t) = b$ bzw. $b(E) = 2\pi\hbar b\delta(E)$, die an \hat{B} angreift, gilt:

$$\delta A_E = 2\pi\hbar b G_{A,B}^{\text{ret}}(i0^+) \delta(E) \quad (4.56)$$

$$\delta A_t = \frac{1}{\hbar} b G_{A,B}^{\text{ret}}(i0^+) \quad (4.57)$$

Die Fluktuation der Systemobservablen \hat{A} unter Einfluss einer konstanten Störung in \hat{B} findet also in der statischen Suszeptibilität ihren Ausdruck.

4.4.1 Longitudinal statische Teilchenstromsuszeptibilität

Einsetzen von (4.25) und (4.35) in (4.35) und weiter in (4.55) ergibt mit (4.23) für den Kondensatanteil der statischen Suszeptibilität zur longitudinalen Stromkorrelationsfunktion:

$$\frac{2n}{\hbar^2 q^2} \sum_{\sigma=-F}^F C_{0\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{E^3}{E + i0^+} \delta(E^2 - \varepsilon_q^2) = \frac{n}{m} \sum_{\sigma=-F}^F C_{0\sigma} \quad (4.58)$$

Ebenso ergibt sich der thermische Beitrag nach Substitution $E \rightarrow x = \frac{E}{2} \sqrt{\frac{\beta}{\varepsilon_q}}$ zu⁵:

$$\frac{n\varepsilon_q}{\hbar^2 q^2 \sqrt{\pi} y} \frac{1 - \sum_{\sigma=-F}^F C_{0\sigma}}{\sum_{\sigma=-F}^F \zeta_{\frac{3}{2}}(\eta\lambda_\sigma)} \sum_{\sigma=-F}^F \int_{-\infty}^{\infty} dx x \left[\zeta_1\left(\eta\lambda_\sigma e^{-(x-y)^2}\right) - \zeta_1\left(\eta\lambda_\sigma e^{-(x+y)^2}\right) \right] \quad (4.59)$$

⁵Der Term $i0^+$ kann hier direkt weggelassen werden, weil das Integral ohnehin an den Grenzen des Definitionsintervalls verschwindet.

Ausschreiben der Polylogarithmen durch Verwendung der Definition (E.21) und anschließende Vertauschung von Integral und Summe ergibt:

$$\frac{n}{2m\sqrt{\pi}y} \frac{1 - \sum_{\sigma=-F}^F C_{0\sigma}}{\sum_{\sigma=-F}^F \zeta_{\frac{3}{2}}(\eta\lambda_{\sigma})} \sum_{\sigma} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(\eta\lambda_{\sigma})^l}{l} \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx x e^{-l(x-y)^2} - \int_{-\infty}^{\infty} dx x e^{-l(x+y)^2} \right] \quad (4.60)$$

Durch Substitution von x durch $x + y$ im ersten Integral und x durch $x - y$ im zweiten Integral, reduziert sich die Differenz der beiden Integrale auf ein Gaußintegral (E.27)

$$2y \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-lx^2} = 2y \sqrt{\frac{\pi}{l}} \quad (4.61)$$

Damit lautet der thermische Anteil schließlich einfach:

$$\frac{n}{m} \sum_{\sigma=-F}^F (1 - C_{0\sigma}) \quad (4.62)$$

Zusammen mit (4.58) folgt:

$$G_{JJ}^{\text{ret}}(q) = \frac{n}{m} \quad (4.63)$$

4.4.2 Statische Dichtesuszeptibilität und transversal statische Teilchenstromsuszeptibilität

Einsetzen von (4.25) oder (4.53) in (4.55) führt nach Substitution von $E \rightarrow x := \frac{E}{2} \sqrt{\frac{\beta}{\varepsilon_q}}$ ($\frac{dE}{E} = \frac{dx}{x}$) auf Ausdrücke die ein Integral des folgenden Typus enthalten:

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\zeta_{\nu}(\eta\lambda_{\sigma} e^{-(x-y)^2}) - \zeta_{\nu}(\eta\lambda_{\sigma} e^{-(x+y)^2})}{xy} \quad (4.64)$$

Verwendung der Definition (E.21) und Vertauschen von Integral und Summe führt auf:

$$\begin{aligned} I &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{xy} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(\eta\lambda_{\sigma})^l}{l^{\nu}} \left(e^{-l(x^2+y^2)} 2 \sinh(2lxy) \right) \\ &= 2 \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(\eta\lambda_{\sigma})^l}{l^{\nu}} \frac{e^{-ly^2}}{y} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{x} e^{-lx^2} \sinh(2lxy) \end{aligned} \quad (4.65)$$

Das verbleibende Integral kann mithilfe eines Tricks gelöst werden: Es sei dasselbe als Funktion von y aufgefasst:

$$f(y) := \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{x} e^{-lx^2} \sinh(2xyl) \quad (4.66)$$

Ableiten nach y führt nach Substitution von x durch $x \mp y$ auf einfache Gaußintegrale (E.27):

$$f'(y) = 2l \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-lx^2} \cosh(2xyl) = le^{ly^2} \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-l(x+y)^2} + \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-l(x-y)^2} \right] = 2\sqrt{l\pi} e^{ly^2} \quad (4.67)$$

Mithilfe der imaginären Errorfunktion

$$\operatorname{erfi}(x) := \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x dx' e^{x'^2} \quad (4.68)$$

gilt:

$$f(y) = \sqrt{l} \int_0^y dy' f'(y') = \pi\sqrt{l} \operatorname{erfi}(y\sqrt{l}). \quad (4.69)$$

Durch Rückeinsetzen in (4.65) kann das Integral in geschlossener Form geschrieben werden:

$$I = 2\pi \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(\eta\lambda_{\sigma})^l e^{-ly^2}}{l^{\nu-\frac{1}{2}} y} \operatorname{erfi}(y\sqrt{l}) \quad (4.70)$$

Ferner gilt mit (4.23):

$$\sum_{\sigma=-F}^F \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{2C_{0\sigma} E \delta(E^2 - \varepsilon_{\mathbf{q}}^2)}{E} = \frac{2 \sum_{\sigma=-F}^F C_{0\sigma}}{\varepsilon_{\mathbf{q}}} = \frac{4m \sum_{\sigma=-F}^F C_{0\sigma}}{\hbar^2 q^2} \quad (4.71)$$

Einsetzen von (4.25) in (4.55) und anschließend von (4.71) sowie (4.70) in den entstehenden Ausdruck ergibt mit (4.24) die statischen Dichte-Suszeptibilitäten:

$$\begin{aligned} G_{\rho,\rho^+}^{\text{ret}}(q) &= \frac{4nm \sum_{\sigma=-F}^F C_{0\sigma} A(\sigma)}{\hbar^2 q^2} \\ &+ \frac{n\sqrt{\beta\pi} \left(1 - \sum_{\sigma=-F}^F C_{0\sigma}\right)}{2\sqrt{\varepsilon_{\mathbf{q}}} \sum_{\sigma=-F}^F \zeta_{\frac{3}{2}}(\eta\lambda_{\sigma})} \sum_{\sigma=-F}^F A(\sigma) \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(\eta\lambda_{\sigma})^l}{l^{\frac{1}{2}}} e^{-\frac{l\beta\varepsilon_{\mathbf{q}}}{4}} \operatorname{erfi}\left(\frac{\sqrt{l\beta\varepsilon_{\mathbf{q}}}}{2}\right) \end{aligned} \quad (4.72)$$

Ebenso folgen aus (4.53), (4.55) und (4.70) die transversal statischen Suszeptibilitäten:

$$G^{\text{ret}\perp}_{J,J^+}(q) = \frac{n}{m} \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{\beta\varepsilon_q}} \frac{1 - \sum_{\sigma=-F}^F C_{0\sigma}}{\zeta_{\frac{3}{2}}(\eta\lambda_\sigma)} \sum_{\sigma=-F}^F A(\sigma) \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(\eta\lambda_\sigma)^l}{l^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{l\beta\varepsilon_q}{4}} \operatorname{erfi}\left(\frac{\sqrt{l\beta\varepsilon_q}}{2}\right) \quad (4.73)$$

Um die analytische Struktur dieser Ausdrücke klarer einsehen zu können, werden sie nunmehr für kleine Werte q in eine Potenzreihe umgeschrieben. Dazu werden die Summanden in (4.70) nach $y = \frac{\sqrt{\beta\varepsilon_q}}{2}$ entwickelt:

$$\frac{1}{y} e^{-ly^2} \operatorname{erfi}(\sqrt{ly}) = \frac{1}{y} \left(\sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{(ly^2)^n}{n!} \right) \left(\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^y dy' \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(y'^2 l)^n}{n!} \right) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(1 - \frac{2}{3} ly^2 + \mathcal{O}(y^4) \right) \quad (4.74)$$

Damit gilt:

$$I = 4\sqrt{\pi} \left(\zeta_{\nu-\frac{1}{2}}(\eta\lambda_\sigma) - \frac{\beta\hbar^2 q^2}{12m} \zeta_{\nu-\frac{1}{2}}(\eta\lambda_\sigma) \right) + \mathcal{O}(q^4) \quad (4.75)$$

Die Asymptotik der statischen (Teilchen)-dichtesuszeptibilitäten lautet also:

$$G^{\text{ret}}_{N,N}(q) = \frac{4nm \sum_{\sigma=-F}^F C_{0\sigma}}{\hbar^2 q^2} + \left(1 - \sum_{\sigma=-F}^F C_{0\sigma} \right) \frac{n\beta \sum_{\sigma=-F}^F \zeta_{\frac{1}{2}}(\eta\lambda_\sigma)}{\sum_{\sigma=-F}^F \zeta_{\frac{3}{2}}(\eta\lambda_\sigma)} + \mathcal{O}(q^2) \quad (4.76)$$

$$G^{\text{ret}\perp}_{JJ}(q) = \frac{n}{m} \left(1 - \sum_{\sigma=-F}^F C_{0\sigma} \right) \left[1 - \frac{\beta\hbar^2 q^2}{12m} \frac{\sum_{\sigma=-F}^F \zeta_{\frac{1}{2}}(\eta\lambda_\sigma)}{\sum_{\sigma=-F}^F \zeta_{\frac{3}{2}}(\eta\lambda_\sigma)} \right] + \mathcal{O}(q^4) \quad (4.77)$$

Es ist zu beachten, dass keine weiteren Terme in der Entwicklung angegeben werden können, da jeweils der erste nicht explizit aufgeschriebene Summand divergiert. Die unendlichen Reihen konvergieren nicht absolut, sondern als alternierende Reihen gemäß dem Leibnitz-Kriterium. Es werden jetzt die Grenzwerte für $q \rightarrow 0$ betrachtet⁶. Für die Teilchenzahl-Suszeptibilität ist folgender Ausdruck auszuwerten:

$$\lim_{y \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\zeta_1(\eta\lambda_\sigma e^{-(x+y)^2}) - \zeta_1(\eta\lambda_\sigma e^{-(x-y)^2})}{xy} \quad (4.78)$$

⁶Da Anteile von (4.72) sowie von (4.73) nicht in eine Potenzreihe entwickelt werden können, ist keineswegs klar, ob die divergierenden Terme sich zu Null aufheben, oder, wie etwa im Falle der Robinson-Entwicklung (3.49), zu einer endlichen Konstanten. Letzterer kann deshalb nicht zuverlässig aus der Asymptotik abgelesen werden.

Es sei zunächst mithilfe von (E.23) und dem Satz von l'Hospital folgender Ausdruck bestimmt:

$$\lim_{y \rightarrow 0} \frac{\zeta_1\left(\eta\lambda_\sigma e^{-(x+y)^2}\right) - \zeta_1\left(\eta\lambda_\sigma e^{-(x-y)^2}\right)}{y} = \lim_{y \rightarrow 0} \frac{\ln\left(\frac{1-\eta\lambda_\sigma e^{-(x-y)^2}}{1-\eta\lambda_\sigma e^{-(x+y)^2}}\right)}{y} = \frac{4x}{\frac{e^{x^2}}{\eta\lambda_\sigma} - 1} \quad (4.79)$$

Vertauschen von Grenzwert und Integral in (4.78) liefert nach Einsetzen von (4.79), zusammen mit (E.32):

$$\lim_{y \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\zeta_1\left(\eta\lambda_\sigma e^{-(x+y)^2}\right) - \zeta_1\left(\eta\lambda_\sigma e^{-(x-y)^2}\right)}{xy} = \sqrt{\pi} \zeta_{\frac{1}{2}}(\eta\lambda_\sigma) \quad (4.80)$$

Damit konvergiert der thermische Anteil der statischen Dichtesuszeptibilität gegen einen endlichen Wert. Folglich divergiert die statische Dichtesuszeptibilität wie ihr Kondensatanteil gemäß:

$$\lim_{q \rightarrow 0} \frac{4nm \sum_{\sigma=-F}^F C_{\mathbf{0}\sigma}}{\hbar^2 q^2} \rightarrow \pm\infty \quad (4.81)$$

Unter Zuhilfenahme von (E.25) und (E.23) kann der Grenzwert der transversal-statischen-Suszeptibilität auf analoge Weise bestimmt werden:

$$\begin{aligned} \lim_{y \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\zeta_2\left(\eta\lambda_\sigma e^{-(x+y)^2}\right) - \zeta_2\left(\eta\lambda_\sigma e^{-(x-y)^2}\right)}{xy} &= 4 \int_{-\infty}^{\infty} dx \ln\left(1 - \eta\lambda_\sigma e^{-x^2}\right) \\ &= -4 \int_{-\infty}^{\infty} \zeta_1(\eta\lambda_\sigma e^{-x^2}) \end{aligned} \quad (4.82)$$

Die Lösung des Integrals im letzten Schritt folgt dabei nach Verwendung von (E.21) und Vertauschung von Summe und Integral unmittelbar aus (E.27).

Mit(4.53), (4.55) und (4.70) folgt als Grenzwert der transversalen, statischen Suszeptibilität:

$$\lim_{q \rightarrow 0} G_{JJ^+}^{\text{ret}\perp}(q) = \frac{n}{m} \left(1 - \sum_{\sigma=-F}^F C_{\mathbf{0}\sigma}\right) \quad (4.83)$$

Wegen der engen Verwandtschaft von statischer Dichte-Suszeptibilität und statischem Strukturfaktor, wird folgend nur die transversal-statische-Suszeptibilität gezeigt.

4.4.3 Diskussion, Kompressibilität und Schallgeschwindigkeit

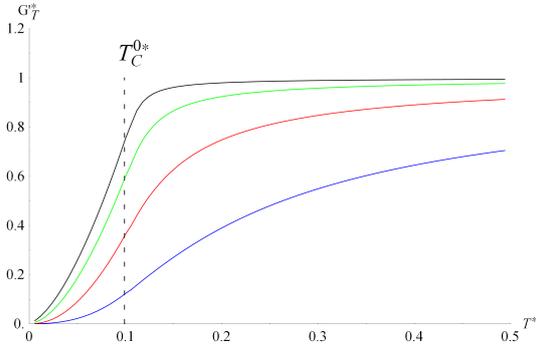


Abbildung 4.4: Transversal statische Suszeptibilität als Funktion der Temperatur für spinentartete Bosonen. Die Kurven entsprechen den Anregungswellenzahlen $q^* = 0, 125$ (schwarz); $0, 25$ (grün); $0, 5$ (rot); und 1 (blau).

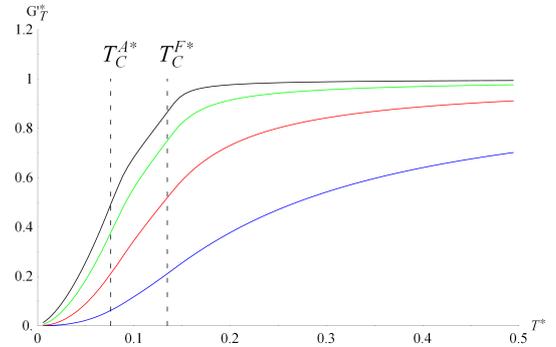


Abbildung 4.5: Transversal statische Suszeptibilität von Spin-1-Bosonen mit fester Magnetisierung $\frac{M}{M_{\max}} = 0,3$ als Funktion der Temperatur. Anregungswellenzahlen wie in Abb. 4.4.

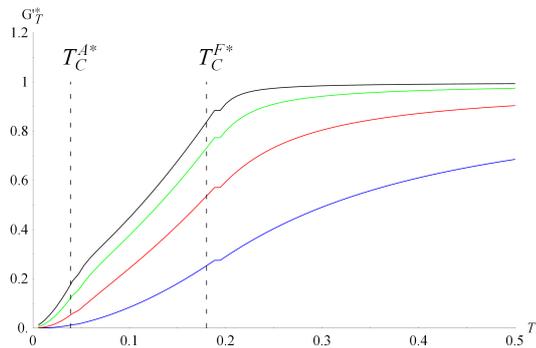


Abbildung 4.6: Wie Abb. 4.5 bei $\frac{M}{M_{\max}} = 0,7$

Die Abbildungen zeigen die transversal-statische Suszeptibilität als Funktion der Temperatur für Bosonen mit unterschiedlicher Magnetisierung und verschiedenem Anregungsimpuls. Die Ergebnisse im Fall $M^* = 0$ reproduzieren die entsprechenden Ergebnisse aus Ref. [34].

Die transversal statische Suszeptibilität beschreibt die Reaktion des Systems auf eine konstante, transversale Störung des Systemimpulses. Für Bosonen verschwindet sie für $T = 0$. Das System reagiert dann überhaupt nicht auf eine transversal angreifende Störung des Impulses. Im nächsten Kapitel wird derjenige Dichteanteil eines Systems als superfluid definiert, der durch Wandreibung (wie sie etwa in einem rotierenden Eimer gegeben ist)

Impuls aufnehmen kann. Es lässt sich deshalb unmittelbar aus den Abb. 4.4–4.6 ablesen, dass die superfluide Dichte von neutralen Bosonen und Spinor-Bosonen bei $T = 0$ durch die volle Massendichte gegeben ist.

Die transversal-statische Suszeptibilität ist eine monotone, mit der Temperatur steigende Funktion, die gegen 1 konvergiert. Für große Anregungswellenzahlen liegt sie höher als für kleine. Sie verschwindet für Bosonen bei $T = 0$. Dies liegt daran, dass die transversal statische Suszeptibilität aus der transversalen Stromkorrelationsfunktion gewonnen wurde, in der der Faktor k^2 in allen Summanden den Kondensatbeitrag unterdrückt. Je größer die Magnetisierung ist, desto höher ist, gemäß den Abbildungen (3.2), (3.4) und (3.6) bei gegebener Temperatur, der Kondensatanteil. Deshalb konvergiert die transversal statische Suszeptibilität desto langsamer, je größer die Magnetisierung ist.

Zur longitudinalen Stromkorrelationsfunktion und damit zur longitudinal statischen Suszeptibilität trägt dagegen der Kondensatanteil bei. Es ist bemerkenswert, dass die Auswirkung eines konstanten Störfeldes, welches den longitudinalen Teilchenstrom (d.h. die Diagonalelemente des Impulsoperators) betrifft, auf die Nicht-Gleichgewichtsthermodynamik des Systems unabhängig von der Temperatur sind.

Die verallgemeinerte Kompressibilität eines physikalischen Systems ist durch den folgenden Ausdruck gegeben:

$$\kappa(q) = \frac{G_{N,N^+}^{\text{ret}}(q)}{n^2} \quad (4.84)$$

Die (statische) Kompressibilität lautet:

$$\kappa = \lim_{q \rightarrow 0} \kappa(q) \quad (4.85)$$

Offensichtlich divergiert sie für neutrale und Spinor-Bosonen gleichermaßen, sobald Kondensation einsetzt. Eine solche Divergenz ist unrealistisch und lässt sich anhand der in Abschnitt 4.2.4 geführten Diskussion auf die quadratische Einteilchen-Dispersionsrelation zurückführen. Sie ist somit ein Artefakt der Idealisierung.

Die Abbildungen zeigen jedoch, dass infolge der erhöhten Kondensationstemperatur im Spinor-System, die Kompressibilität bei gleicher Temperatur im neutralen System endlich sein kann, während sie im Spinor-System divergiert.

Eine Betrachtung der Schallgeschwindigkeit macht den Fall noch eindrücklicher: Mit der elementaren Relation zwischen Schallgeschwindigkeit und isothermer Kompressibilität

$$v_s = \sqrt{\frac{1}{m\rho\kappa_T}} \quad (4.86)$$

ist klar, dass es ein Temperaturintervall gibt, in dem das ideale neutrale Bosonensystem den Schall überhaupt nicht leitet, wohingegen die Schallgeschwindigkeit im magnetisierten idealen Bosonensystem endlich ist.

Kapitel 5

Anwendungen

5.1 Superfluidität

Superfluidität bezeichnet die Eigenschaft eines physikalischen Systems, bei hinreichend langsamer Bewegungsgeschwindigkeit keinen Energieverlust durch innere oder äußere Reibung zu erfahren. Ein physikalisches System wird als Superfluid bezeichnet, wenn immerhin ein Anteil seiner Massendichte ρ_s die Eigenschaft der Superfluidität besitzt.

Die physikalische Ursache für das Auftreten von Superfluidität besteht in der Eigenschaft von Superfluiden nicht beliebig wenig, sondern nur diskrete Energiemengen absorbieren zu können und deshalb bei hinreichend langsamer Bewegungsgeschwindigkeit keine Reibungsenergieverluste erfahren zu können. Eine zweckdienlich Beschreibung ist durch das Zwei-Komponenten-Modell gegeben, nach dem ein Superfluid aus einer superflüssigen Komponente der Dichte ρ_s und einer normalfluiden Komponente der Dichte $\rho_n = \rho - \rho_s$ besteht, die sich gegenseitig durchdringen. Es ist zu betonen, dass die Eigenschaft der Superfluidität infolge der Ununterscheidbarkeit der Teilchen Eigenschaft des Systems als Ganzem ist und keinesfalls einzelne Atome mit der Eigenschaft der Superfluidität assoziiert werden dürfen. In diesem Sinne ist die Klassifikation der Dichte in zwei Komponenten als rein denkökonomische Lizenz ohne objektivierbare physikalische Realität zu verstehen.

Die Eigenschaft der Superfluidität ist nachgewiesen, wenn gezeigt ist, dass sowohl die superfluide Dichte, als auch die kritische Geschwindigkeit, also die Minimalgeschwindigkeit des Systems, ab der Reibungsenergie absorbiert werden kann, positiv ist.

Dieses Kapitel beginnt mit einer Darstellung der Kerngedanken der Landau-Theorie der Superfluidität [57, 21], inklusive einer Ableitung der sogenannten Landau-Definition der superfluiden Dichte. In der Literatur konkurriert der als makroskopische oder Landau-Definition bezeichnete Term der superfluiden Dichte mit der sogenannten mikroskopischen

Definition. Es folgt deshalb auch eine Ableitung des mikroskopischen Ausdrucks und eine vergleichende Diskussion. Der Ausgangspunkt zur Definition der superfluiden Dichte ist in beiden Fällen durch die Vorstellung gegeben, dass nur der Bewegungszustand des normalfluiden Anteils eines Fluidums durch Wandreibung beeinflusst wird. Schließlich wird der Superfluiditätscharakter idealer Spinor-Bose-Gase untersucht.

5.1.1 Grundlagen und Landau-Definition der superfluiden Dichte

Es sei ein Fluid im Grundzustand betrachtet, welches mit der Geschwindigkeit \mathbf{v} durch eine ruhende Kapillare fließt. Durch Wandreibung wird die äußerste Schicht des Fluidums abgebremst und durch innere Reibung die übrigen Atome, bis im thermodynamischen Gleichgewicht (insbesondere ist das System Wand-Fluidum dann im mechanisches Gleichgewicht) das Fluidum sich mit derselben Geschwindigkeit wie die Kapillare bewegt. Die Beschleunigung des Fluids durch Wandreibung setzt jedoch voraus, dass die Fluidatome angeregt werden können: Nimmt ein Atom durch Wandreibung den (negativen) Impuls \mathbf{p} auf, so verändern sich dadurch der Systemimpuls \mathbf{P} und die kinetische Systemenergie $\frac{\mathbf{P}^2}{2M}$ im Ruhesystem der Kapillare wie folgt:

$$\mathbf{P} \rightarrow \mathbf{P}' = \mathbf{P} + \mathbf{p} \quad (5.1)$$

$$\frac{\mathbf{P}^2}{2M} \rightarrow \frac{\mathbf{P}'^2}{2M} = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \mathbf{p} \cdot \mathbf{v} + \frac{\mathbf{p}^2}{2M} \quad (5.2)$$

Es geht Energie an die Kapillare verloren, wenn $\mathbf{p} \cdot \mathbf{v} + \frac{\mathbf{p}^2}{2M} < 0$ ist. Jeder Verlust an kinetischer Energie muss infolge der Energieerhaltung von einem Systemteilchen aufgenommen werden. Es kann also nur Energie abgegeben werden, wenn $\varepsilon_{\mathbf{p}} < \mathbf{p} \cdot \mathbf{v} + \frac{\mathbf{p}^2}{2M}$ gilt. Die minimale Energieabgabe ist deshalb durch das Minimum des Energiespektrums $\varepsilon(\mathbf{p})$ nach unten beschränkt. Gilt dagegen $\varepsilon_{\mathbf{p}} > \mathbf{p} \cdot \mathbf{v} + \frac{\mathbf{p}^2}{2M}$ ist ein Verlust an Reibungsenergieverlust ausgeschlossen, weil derselbe nicht hinreichte ein Teilchen aus dem Grundzustand in das niedrigste angeregte Niveau anzuregen. Das Fluid kann also (mit $\frac{\mathbf{p}^2}{2M} \approx 0$ in makroskopischen Systemen) nur für Geschwindigkeiten,

$$v > v_c = \text{Min} \frac{\varepsilon_{\mathbf{p}}}{p} \quad (5.3)$$

kinetische Energie an die Kapillare verlieren. Für Geschwindigkeiten die kleiner als diese „kritische Geschwindigkeit“ sind, kann das Fluid unmöglich Energie abgeben. Es fließt dann ohne jeden Reibungswiderstand.

Diese Überlegung kann sogleich auf endliche Temperaturen erweitert werden, da nur die Möglichkeit eines potentiell hinzukommenden Anregungsquants diskutiert wurde. Für $T > 0$ befinden sich schon vor Wechselwirkung mit der Kapillare angeregte Atome im

System. Es kann auch dann kein neues Anregungsquant hinzukommen und es bleibt allein die Auswirkung der Abgabe eines Impulsquants auf den Gesamtimpuls des Quasiteilchengases zu berücksichtigen. In der Landau-Theorie wird das Quasiteilchengas als ideal genähert. Die Quasiteilchenverteilungsfunktion ist deshalb durch die Bose-Einstein-Verteilungsfunktion gegeben und verändert sich bei Abgabe eines Impulsquants p gemäß

$$n(\varepsilon) \rightarrow n(\varepsilon - \mathbf{p} \cdot \mathbf{v}) \approx n(\varepsilon) + \left. \frac{\partial n(\varepsilon - \mathbf{p} \cdot \mathbf{v})}{\partial \varepsilon} \right|_{pv=0} \mathbf{p} \cdot \mathbf{v} + \mathcal{O}(v^2) \quad (5.4)$$

Für den Gesamtimpuls des Quasiteilchengases im Gleichgewicht gilt dann nach Entwicklung bezüglich $\mathbf{p} \cdot \mathbf{v}$ bis zur linearen Ordnung um den Ursprung:

$$\mathbf{P} = \int d^3p \mathbf{p} n(\varepsilon) \rightarrow \mathbf{P}' = \int d^3p \mathbf{p} n(\varepsilon - \mathbf{p} \cdot \mathbf{v}) \approx -\mathbf{v} \int d^3p \mathbf{p}^2 \frac{dn(\varepsilon)}{d\varepsilon} \quad (5.5)$$

Nach Wahl eines Koordinatensystems, in dem $\mathbf{p} = p\mathbf{e}_z$ und $\mathbf{v} = v\mathbf{e}_z$ gilt, folgt nach Mittelung über alle Raumrichtungen:

$$\mathbf{P}' \approx \frac{-\mathbf{v}}{3} \int d^3p p^2 \frac{dn(\varepsilon)}{d\varepsilon} \quad (5.6)$$

Dem Zweikomponentenmodell liegt die Vorstellung zugrunde, dass nur Atome in angeregten Energieniveaus am Impulsaustausch mit der Kapillare beteiligt sein können. Dadurch wird nahe gelegt, denjenigen Anteil, der Impuls abgeben kann, als normalfluid aufzufassen und den Rest als superfluid. Da die Bewegung der Quasiteilchen mit einem Massentransport verknüpft ist, kann die normalfluide Dichte mit (5.6) wie folgt definiert werden:

$$\rho_n = \frac{-1}{3V} \int d^3p p^2 \frac{dn(\varepsilon)}{d\varepsilon} \quad (5.7)$$

Es bleibt zu bemerken, dass in der obigen Ableitung der kritischen Geschwindigkeit allein die Möglichkeit von Einteilchenanregungen diskutiert wurde. Da Vielteilchensysteme auch kollektiv angeregt werden können, ist die tatsächliche kritische Geschwindigkeit im Allgemeinen kleiner. Der auch Landau kritische Geschwindigkeit genannte Ausdruck (5.3) gibt deshalb nur eine theoretische Obergrenze der kritischen Geschwindigkeit an.

5.1.2 Mikroskopische Definition der superfluiden Dichte

Ebenso wie in einer Kapillare, reagiert auch in einem rotierendem Eimer nur der normalfluide Anteil auf dessen Wände. Die mikroskopische Definitionsgleichung der superfluiden Dichte folgt durch eine quantitative Analyse dieses Gedankenexperimentes mithilfe der Linear-Response-Theorie [58, 55]. Dieses Experiment bietet die Möglichkeit, über die Messung des Trägheitsmoments direkt die superfluide Dichte als Messgröße zu erhalten. Besonders in Bose-Einstein-Kondensaten findet dies Anwendung, indem mit Lasern im Kondensat gerührt und die Veränderung des Trägheitsmomentes gemessen wird.

Es sei zunächst ein freies im Laborsystem konstant rotierendes Fluidum im thermodynamischen Gleichgewicht betrachtet. Dieser Zustand gelte als ungestört. Im Ruhesystem des Fluids, rotiert der Eimer mit der Winkelgeschwindigkeit $-\omega$ und kann als Störfeld $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \omega \times \mathbf{r}$, welches transversal an den Systemimpuls angreift, berücksichtigt werden. Es interessiert jetzt, wie sich die Massenstromdichte ($\frac{m^2}{V}\mathbf{J}_{\mathbf{q}}$) des anfangs ruhenden Fluids nach unendlich langer Einwirkung des Störfeldes verändert hat. (Dann ist der Gleichgewichtszustand bei Anwesenheit des Eimers erreicht).

Mit $\mathbf{v}_n = \omega \times \mathbf{r}$ kann dieser Massenstrom einfach durch folgenden Ausdruck beschrieben werden:

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = \rho_n \mathbf{v}_n + \rho_s \mathbf{v}_s = \rho_n (\omega \times \mathbf{r}) \quad (5.8)$$

Andererseits kann er in linearer Response Näherung durch die allgemeine Störformel (4.2) ausgedrückt werden:

$$\langle \mathbf{J}_{\mathbf{q}} \rangle_{t \rightarrow \infty} - \underbrace{\langle \mathbf{J}_{\mathbf{q}} \rangle_{t \rightarrow 0}}_{=0} = -m^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt' A(\mathbf{q}, \mathbf{t}) G_{\mathbf{J}_{\mathbf{q}} \mathbf{J}_{\mathbf{q}}}^{\perp, \text{ret}}(t - t') \quad (5.9)$$

Der zusätzliche Faktor $\frac{m^2}{V}$ rührt daher, dass hier die Massenstromdichte anstatt des Teilchenzahlstroms Betrachtung findet. Das negative Vorzeichen beruht auf der Tatsache, dass der rotierende Eimer im Ruhesystem der Flüssigkeit einem *passiv* rotierenden Koordinatensystem entspricht.

$$\langle \mathbf{J}_{\mathbf{q}} \rangle_{t \rightarrow \infty} = \frac{-m^2 A(\mathbf{q})}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dE G_{\mathbf{J}_{\mathbf{q}} \mathbf{J}_{\mathbf{q}}}^{\perp, \text{ret}}(\mathbf{q}, E) \quad (5.10)$$

Ohne Beschränkung der Allgemeingültigkeit kann ein beliebig langsam rotierender Eimer betrachtet werden, so dass $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ räumlich praktisch nicht variiert. Dann gilt:

$$\mathbf{A}(\mathbf{q}) = \int d^3r \mathbf{A}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} = 2\pi\hbar \mathbf{A} \delta(\mathbf{q}) \quad (5.11)$$

Einsetzen von (5.11) in (5.10) ergibt nach Fourier Transformation und Ausführen des Zeitintegrals zusammen mit (5.8):

$$\langle \mathbf{J}_{\mathbf{q}} \rangle_{t \rightarrow \infty} = -m^2 \lim_{q \rightarrow 0} G_{\mathbf{J}_{\mathbf{q}} \mathbf{J}_{\mathbf{q}}}^{\perp, \text{ret}}(\mathbf{q}, E = 0) \quad (5.12)$$

Mit der Transformationsformel (A.37) folgt schließlich:

$$\rho_n = m^2 \lim_{q \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{G_{\mathbf{J}_{\mathbf{q}} \mathbf{J}_{\mathbf{q}}}^{\perp, \text{ret}}(\mathbf{q}, E)}{E - i0^+} \quad (5.13)$$

Dies ist die mikroskopische Bestimmungsgleichung der normalfluiden Dichte.

5.1.3 Vergleichende Diskussion

Da in der Landau-Theorie der Superfluidität die Wechselwirkung der Anregungen außer Acht gelassen wird, ist der dort abgeleitete Ausdruck i.A. nicht exakt. Dagegen war bei der Ableitung des mikroskopischen Ausdrucks keine Annahme zur Wechselwirkung der Quasiteilchen nötig. Der mikroskopische Ausdruck gilt als exakt. Im Allgemeinen gilt deshalb keine Äquivalenz zwischen der mikroskopischen Definition und der Landau-Definition, weil letztere Quasiteilchenwechselwirkungen unterschlägt. Im Falle idealer Systeme bilden natürlich auch die Quasiteilchen ein ideales Gas und die beiden Definitionen sind äquivalent. Dies wird im Folgenden gezeigt. R. Balian und C. Dominicis zeigten 1971, dass die mikroskopische Definition auch in wechselwirkenden Systemen bei Vernachlässigung der Quasiteilchenwechselwirkung in die Landau-Definition übergeht [59].

Beweis der Äquivalenz für ideale Systeme

Mit (4.41) kann die normalfluide Dichte (5.13) in folgenden Ausdruck umgeschrieben werden:

$$\rho_n = \frac{\hbar^2}{2V} \lim_{q \rightarrow 0} \sum_{\mathbf{k}\sigma} k^2 \left[1 - \left(\frac{\mathbf{q}\mathbf{k}}{qk} \right)^2 \right] \frac{n_{\mathbf{k}\sigma} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}}{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} - \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}} \quad (5.14)$$

Betrachte:

$$\lim_{q \rightarrow 0} \left(n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} - n_{\mathbf{k}\sigma} \right) = \lim_{q \rightarrow 0} \mathbf{q} \frac{n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} - n_{\mathbf{k}\sigma}}{\mathbf{q}} = \lim_{q \rightarrow 0} \mathbf{q} (\nabla_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}\sigma}) \quad (5.15)$$

Ebenso gilt:

$$\lim_{q \rightarrow 0} \left(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} - \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} \right) = \lim_{q \rightarrow 0} \mathbf{q} (\nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}) \quad (5.16)$$

Insgesamt kann damit der Grenzwert wie folgt geschrieben werden:

$$\begin{aligned} \lim_{q \rightarrow 0} \frac{n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} - n_{\mathbf{k}\sigma}}{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} - \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}} &= \frac{\mathbf{q} (\nabla_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}\sigma})}{\mathbf{q} (\nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma})} = \frac{\partial n_{\mathbf{k}\sigma}}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}} = \frac{\partial}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}} \left(\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} - \mu)} + \eta} \right) \\ &= \frac{\beta e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} - \mu)}}{\left(e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} - \mu)} + \eta \right)^2} \end{aligned} \quad (5.17)$$

Damit lautet (5.14):

$$\rho_n = \frac{\hbar^2 \beta}{2V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} k^2 (1 - \xi^2) \left(\frac{\beta e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} - \mu)}}{\left(e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} - \mu)} + \eta \right)^2} \right) \quad (5.18)$$

Nach Mittelung über alle Raumrichtungen

$$\sum_{\mathbf{k}} \frac{(\mathbf{k}\mathbf{q})^2}{(kq)^2} = \sum_k \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha \cos^2(\alpha) = \sum_k \frac{1}{3} \quad (5.19)$$

folgt die Landau Definition der normalfluiden Dichte.

$$\rho_n = \frac{\hbar^2 \beta}{3V} \sum_{k\sigma} k^2 \frac{e^{\beta \varepsilon_{k\sigma}}}{(e^{\beta \varepsilon_{k\sigma}} - 1)^2} \quad (5.20)$$

5.1.4 Superfluide Dichte idealer Spinorquantengase

Der Grundzustand des freien, idealen Bose-Gases ist bekanntlich ein metastabiles Superfluid [58]. Bei $T = 0$ sind alle Teilchen im Grundzustand und die superfluide Dichte ist gleich dem Produkt aus Massendichte mn und Kondensatanteil C_0 . Andererseits verschwindet die kritische Geschwindigkeit infolge der quadratischen Dispersionsrelation. Ein solches Superfluid ist instabil gegenüber jeder beliebig langsamen Bewegung. Die Superfluidität des freien, idealen Bose-Gases ist also prinzipiell nicht messbar und damit von rein theoretischer Natur.

Es wird jetzt untersucht, ob ein ideales, magnetisiertes Bose-Gas ein stabiles Superfluid darstellt. Hierzu sind die folgenden beiden Kriterien nachzuweisen:

$$1.) \quad \rho_s > 0 \quad (5.21)$$

$$2.) \quad v_c > 0 \quad (5.22)$$

5.1.5 Auswertung mittels der mikroskopischen Definition

Mit (4.55), (4.83) und (5.13) ergibt sich für die superfluide Dichte idealer Spinor-Bosonen:

$$\rho_n = nm \left(1 - \sum_{\sigma=-F}^F C_{0\sigma}\right) = \rho(1 - C_{0F} - 2FC_{0\sigma}) \quad (5.23)$$

Mit $\rho = \rho_s + \rho_n$ lautet die superfluide Dichte:

$$\rho_s = \rho(C_{0F} + 2FC'_{\mathbf{0}}) \quad (5.24)$$

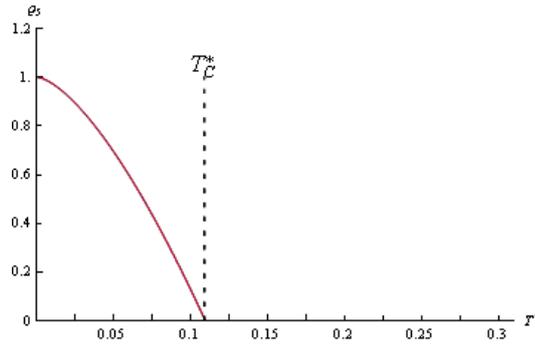


Abbildung 5.1: Superfluide Dichte spinentarteter Bosonen. Die gebrochene Linie markiert den Phasenübergang.

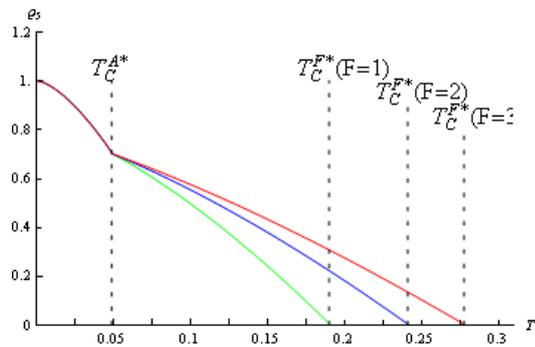


Abbildung 5.2: Superfluide Dichte als Funktion der Temperatur für Spinor-Bosonen mit Spin 1 (grün) Spin 2 (blau) und Spin 3 (rot) bei fester Magnetisierung $\frac{M}{M_{\max}} = 0.7$. Die gebrochenen Linien markieren die Phasenübergänge zwischen Gasphase und ferromagnetischer Phase (T_C^F) und zwischen ferromagnetischer und antiferromagnetischen Phase (T_C^A).

Im neutralen System zeigt die superfluide Dichte dasselbe $1 - \left(\frac{T}{T_C}\right)^{\frac{3}{2}}$ -Verhalten wie die Kondensatdichte. Für magnetisierte Bosonen gilt diese Temperaturabhängigkeit nur in der antiferromagnetischen Phase, wo kein effektives Magnetfeld im System wirkt. In der ferromagnetischen Phase kondensiert allein der $\sigma = F$ -Zustand. Deshalb ändert sich die Kondensatdichte und damit mit (5.23) auch die superfluide Dichte langsamer mit der Temperatur als in der antiferromagnetischen Phase, wo alle Spinzustände simultan kondensieren. Der Phasenübergang in T_C^A wird deshalb in der superfluiden Dichte durch den „Knick“ in Abb. 5.2 besonders deutlich.

Abb. 5.2 zeigt, dass die superfluide Dichte des magnetisierten Systems mit steigender Temperatur schneller abnimmt als im freien, idealen Bose-Gas. Da jedoch die Kondensation infolge der Magnetisierung schon bei höheren Temperaturen einsetzt, weisen Spinor-Bosonen selbst bei höheren Temperaturen noch eine positive superfluide Dichte auf.

Kritische Geschwindigkeit

Für die kritische Geschwindigkeit gilt nach (5.3):

$$v_c = \text{Min}\left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}}{p}\right) = \text{Min}\left(\frac{\hbar k}{2m} - \frac{\alpha\sigma}{k\sigma}\right) \quad (5.25)$$

Zwischen T_C^F und T_C^A ist nur der $\sigma = F$ -Zustand kondensiert. Für diesen ist jedoch die kritische Geschwindigkeit negativ. Unterhalb von T_C^A kondensieren auch die anderen Komponenten. Da das effektiv im System wirkende Feld in der antiferromagnetischen Phase verschwindet, ist das System dort wie das Ideale Bose-Gas ein metastabiles Superfluid mit kritischer Geschwindigkeit $v_c = 0$.

Für beliebig schwache repulsive Wechselwirkungen hat das Einteilchenspektrum jedoch immer einen Phononenanteil, folglich eine positive kritische Geschwindigkeit und schließlich wird die superfluide Dichte messbar.

5.1.6 Kontrolle des Ergebnisses mittels der Landau Definition

$$\rho_n = \frac{\hbar^2 \beta}{3V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} k^2 \frac{e^{\beta\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}}}{\left(e^{\beta\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}} - 1\right)^2} \quad (5.26)$$

Mit Hilfe der Ersetzung $\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow V \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}$ folgt nach Übergang in ein sphärisches Koordinatensystem:

$$\rho_n = \frac{4\pi\hbar^2\beta}{3(2\pi)^3} \sum_{\sigma=-F_0}^F \int_0^\infty dk k^4 \frac{e^{\beta\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}}}{\left(e^{\beta\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}} - 1\right)^2} \quad (5.27)$$

Durch Verwendung eines Tricks lässt sich dieses Integral auf ein bereits bekanntes zurückführen. Betrachte hierzu:

$$\frac{\partial}{\partial k} n_{\mathbf{k}\sigma} = -\beta \left[\frac{\partial\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}}{\partial k} \cdot \frac{e^{\beta\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}}}{\left(e^{\beta\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}} - 1\right)^2} \right] \quad (5.28)$$

Mit

$$\frac{\partial\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}}{\partial k} = \frac{\hbar^2 k}{m} \quad (5.29)$$

kann die normalfluide Dichte in folgende Form geschrieben werden:

$$\rho_n = \frac{-4\pi m}{3(2\pi)^3} \sum_{\sigma=-F_0}^F \int_0^\infty dk k^3 \frac{\partial n_{\mathbf{k}\sigma}}{\partial k} \quad (5.30)$$

Nach partieller Integration entfällt der Randterm, weil am unteren Rand der Faktor k^3 und am oberen die Verteilungsfunktion verschwindet und es bleibt nach Verwendung von (E.30) der einfache Ausdruck:

$$\rho_n = \frac{m}{\eta\lambda_T^3} \sum_{\sigma=-F}^F \zeta_{\frac{3}{2}}(\eta\lambda_\sigma) \quad (5.31)$$

Mit (3.25) ist das Ergebnis (5.23) reproduziert:

$$\rho_n = mn \left(1 - \sum_{\sigma=-F}^F C_{0\sigma} \right) \quad (5.32)$$

5.1.7 Josephson Relation zwischen superfluider Dichte und Kondensatdichte

Die Josephson Relation [60] ist eine allein auf thermodynamischen Überlegungen beruhende Beziehung zwischen superfluider Dichte und BEK-Dichte. Es wird jetzt die übliche Form auf ideale, magnetisierte Systeme erweitert:

Mit (2.34) gilt:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{G''_{\mathbf{k}\sigma}(E)}{E + i0^+} = \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{\hbar\delta(E - \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma})}{E + i0^+} = \frac{\hbar}{\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}} \quad (5.33)$$

und $n_0 := \sum_{\sigma=-F}^F n_{0\sigma}$ lautet die Josephson Relation für Systeme mit Hamiltonoperator vom Einteilchentyp:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{G''_{\mathbf{k}\sigma}(E)}{E + i0^+} = \frac{m\hbar}{V\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}} \left(\frac{n_0}{\rho_s} \right) \quad (5.34)$$

Für $\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} = \varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ geht dieser Ausdruck in den aus der Literatur bekannten Ausdruck für freie Systeme über: Es sei bemerkt, dass an keiner Stelle auf Bosonen spezialisiert wurde, weshalb die Relation im Prinzip auch für ideale Fermionensysteme bewiesen ist.

5.2 Strukturfaktor

Der Strukturfaktor beschreibt das Streuvermögen eines Vielteilchensystems. Ein einfliegendes Streuteilchen (Sonde) kann entweder kohärent oder inkohärent gestreut werden. Kohärente Streuung beschreibt die Wechselwirkung der Sonde mit dem System als Ganzem. Sie kann sowohl elastisch als auch inelastisch sein. Inkohärente Streuung beruht auf

der Wechselwirkung innerer Freiheitsgrade und beschreibt die Streuung der Sonde an Einzelteilchen des Systems. Sie kann nur in Zusammenhang mit einem Energieübertrag stattfinden und ist damit immer inelastisch [56].

In Neutronen oder Photonenstreuexperimenten kann der dynamische Strukturfaktor, wie in Abschnitt 1.5 erläutert, direkt gemessen werden. Der Zusammenhang zum doppelt differentiellen Wirkungsquerschnitt ist durch den folgenden Ausdruck gegeben [61]:

$$\frac{1}{N} \frac{d^2\sigma}{d\Omega_{\mathbf{q}} d\omega} = a_s^2 \frac{k_e}{k_a} S_F(E, \mathbf{q}) \quad (5.35)$$

Darin ist $\Omega_{\mathbf{q}}$ das Raumwinkelelement um den Wellenvektor $\mathbf{q} = \mathbf{k}_e - \mathbf{k}_a$ und $|\hbar\mathbf{k}_e\rangle$, $|\hbar\mathbf{k}_a\rangle$ sind die Impulszustände der Sonde nach und vor dem Streuprozess sowie a_s die s -Wellen-Streulänge. Der dynamische Strukturfaktor ist deshalb ein Maß für die Streuwahrscheinlichkeit neutraler Teilchen wie Neutronen und Photonen. Es sei betont, dass der im Wirkungsquerschnitt auftretende Strukturfaktor der vollständige Strukturfaktor ist, während im Folgenden nur derjenige Anteil, der kohärente Streuung beschreibt, Betrachtung findet. Der inkohärente Streuanteil kann jedoch vernachlässigt werden, weil aufgrund der Vernachlässigung der magnetischen Dipol-Dipol Wechselwirkung keine Wechselwirkung innerer Freiheitsgrade gegeben ist.

5.2.1 Dynamischer Strukturfaktor

Der dynamische Strukturfaktor ist definiert als:

$$S(\mathbf{q}, E) := \frac{1}{2\pi N} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{\frac{i}{\hbar}Et} \langle \delta N_{\mathbf{q}}(t) \delta N_{\mathbf{q}}^+(t' = 0) \rangle \quad (5.36)$$

Mit (A.20) und $\langle \hat{N}_{\mathbf{q}} \rangle = \delta_{q,0} N_{\mathbf{q}}$ in homogenen Systemen, folgt für $E \neq 0$ und $q \neq 0$:

$$S(\mathbf{q}, E) = \frac{V\hbar}{N} \frac{G''_{N+N}(\mathbf{q}, -E)}{e^{-\beta E} - \eta} \quad (5.37)$$

Diese Gleichung zeigt, dass der dynamische Strukturfaktor im Unterschied zu den Spektralfunktionen keine antisymmetrische Funktion ist. Mit (A.19) lässt sich der dynamische Strukturfaktor auch als Korrelationsfunktion schreiben:

$$S(\mathbf{q}, E) = \frac{1}{2\pi N} \langle \hat{N}_{\mathbf{q}} \hat{N}_{\mathbf{q}}^+ \rangle (-E) \quad (5.38)$$

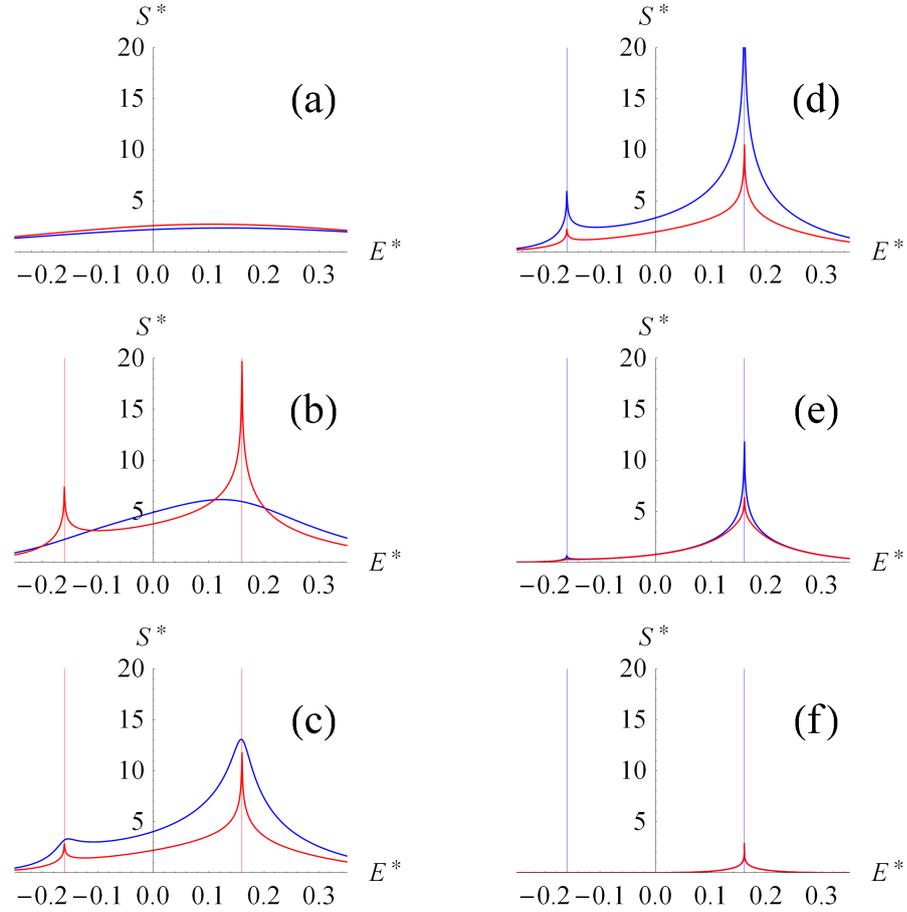


Abbildung 5.3: Energieabhängiger dynamischer Strukturfaktor $S^* := \frac{S}{\pi}$ für Bosonen mit Spin 1 bei fester Magnetisierung $\frac{M}{M_{\max}} = 0$ (blau) und $\frac{M}{M_{\max}} = 0,7$ (rot) sowie fester Anregungswellenzahl $q^* = 0,4$ bei Temperatur $T^* = 0,491(a)$, $0,164(b)$, $0,114(c)$, $0,104(d)$, $0,055(e)$, $0,011(f)$.

Abb. 5.3 zeigt den dynamischen Strukturfaktor von neutralen Bosonen und Spinor-Bosonen als Funktion der Sondenenergie bei verschiedenen Temperaturen und fester Wellenzahl der Sonde. Die Ergebnisse reproduzieren im Spezialfall verschwindender Magnetisierung die entsprechenden Ergebnisse aus Ref. [62].

Im Kondensatanteil können entsprechend der Erläuterung in Abschnitt 4.2.4 allein Phononen mit der Dispersion der Störung entstehen. Sobald Kondensation einsetzt, bilden sich deshalb Delta-Peaks bei $E = \pm\varepsilon(\mathbf{q})$ aus. Bei tiefer Temperatur bildet auch der thermische Beitrag einen Peak um $E = \pm\varepsilon(\mathbf{q})$, weil die meisten Systematome in tiefen Energieniveaus sind und die Dispersion der Sonde höchstens noch schwach zu manipulieren vermögen. Das Höhenverhältnis der thermischen Peaks ist durch den Faktor $\frac{1}{e^{-\beta E} - \eta}$ gegeben. Aufgrund der einfachen Verknüpfung (5.37) zwischen dynamischem Strukturfaktor und Teilchendichtespektralfunktion ist klar, dass entsprechend der in Abschnitt 4.2.4 geführten

Diskussion im Bereich hoher Temperaturen quantitative Unterschiede im Streuvermögen zwischen neutralen und Spinor-Bosonen, für tiefe Temperaturen überhaupt keine und in einem Temperaturbereich dazwischen qualitative Veränderungen auftreten, deren Wurzeln in der Gleichgewichtsthermodynamik liegen. Der vorliegende Peak im Spinor-System in Abb. 5.3b erklärt sich somit wieder aus dem Anstieg der kritischen Temperatur mit der Magnetisierung.

5.2.2 Statischer Strukturfaktor

In Experimenten ohne Energieauflösung, wenn nur der einfach differentielle Wirkungsquerschnitt gemessen wird, interessiert die totale Absorptionswahrscheinlichkeit eines Impulsquants $\hbar\mathbf{q}$. Der statische Strukturfaktor trägt einer derartigen Situation Rechnung. Der statische Strukturfaktor ist durch Integration des dynamischen Strukturfaktors über alle Energien gegeben:

$$S(\mathbf{q}) := \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dE S(E, \mathbf{q}) \quad (5.39)$$

Die folgenden Bilder zeigen den reduzierten statischen Strukturfaktor $S_F^*(\mathbf{q}) := \frac{m}{n} S_F(\mathbf{q})$ idealer Quantengase bei verschiedenen Temperaturen und Spinfreiheitsgeraden, aufgetragen über der reduzierten Wellenzahl \mathbf{q}^* .

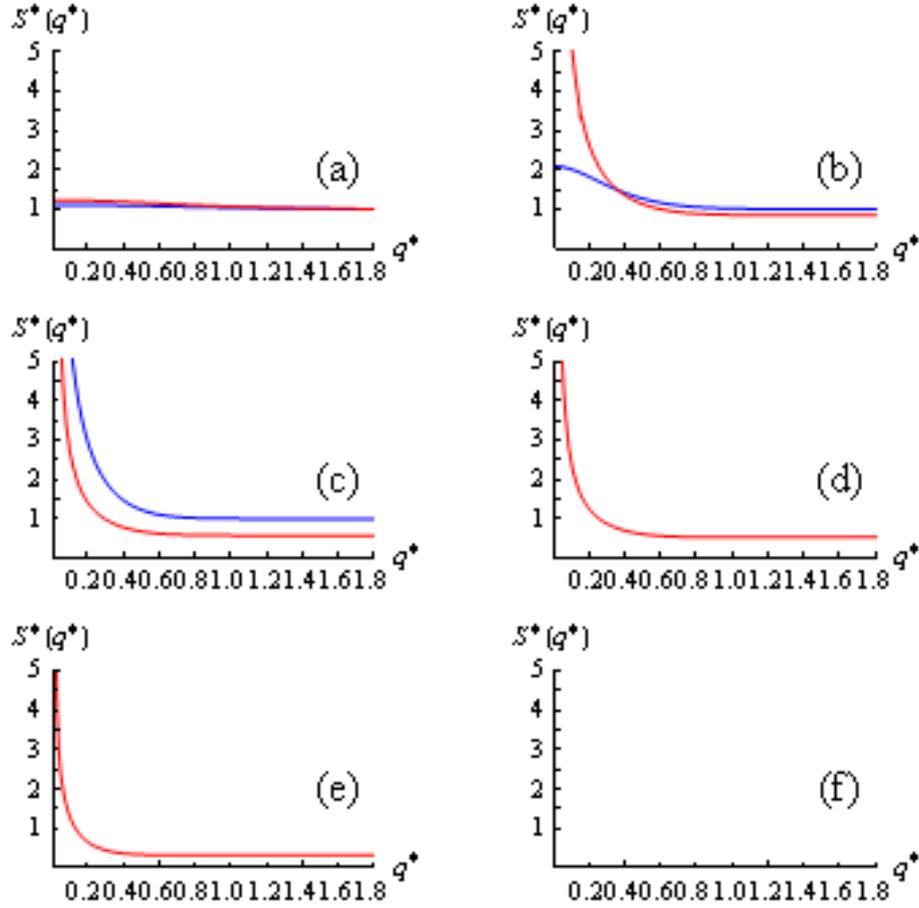


Abbildung 5.4: Reduzierter statischer Strukturfaktor $S(q^*)$ als Funktion der Anregungswellenzahl q^* für Spin-1-Bosonen. Magnetisierung und Temperatur wie in Abb. 5.3.

Abb. 5.4 zeigt den statischen Strukturfaktor von neutralen Bosonen und Spinor-Bosonen als Funktion der Sondenwellenzahl bei verschiedenen Temperaturen. Die Ergebnisse reproduzieren im Spezialfall neutraler Bosonen erneut die in Ref. [62] dargelegten Resultate.

Der Anstieg des statischen Strukturfaktors idealer Bosonen in der klein \mathbf{q} -Region ist eine direkte Konsequenz der Symmetrie der Wellenfunktion. Er beruht auf der Tatsache, dass sich für Boson die Wahrscheinlichkeit für einen bestimmten Quantenzustand erhöht, sobald sich dort bereits ein anderes Boson befindet (vgl. Abschnitt 1.2). Unterhalb der Kondensationstemperatur, befindet sich eine makroskopische Bosonenzahl im selben Quantenzustand und $S(q \rightarrow 0)$ divergiert. Eine solche Divergenz der Absorptionswahrscheinlichkeit ist unphysikalisch und eine weitere Folge der Idealisierung. In realen Systemen ist stets Energie in der Zweiteilchenwechselwirkung gespeichert, so dass immer Absorption möglich ist.

Bei nicht zu tiefen Temperaturen konvergiert der statische Strukturfaktor $S(\mathbf{q} \rightarrow \infty)$ im

Limes großer Sondenimpulse gegen 1, und zwar desto langsamer je höher die Temperatur ist, weil dann keine Teilchen in vergleichbar hohen Impulszuständen wie die Sonde vorliegen und damit ihre statistische Wechselwirkung mit Systemteilchen irrelevant wird. Für tiefe Temperaturen konvergiert der statische Strukturfaktor offensichtlich gegen einen kleineren Wert. Warum? Dies liegt daran, dass das BEK seinen Ausdruck im Delta-Peak findet und darüber keinen Beitrag zum Strukturfaktor leistet.

Kapitel 6

Fermionen

In einem System idealer Fermionen gibt es keine Bose-Einstein-Kondensation. Die Betrachtung solcher Systeme verdient trotzdem ein gewichtiges Interesse: Als Folge des seit der experimentellen Erzeugung eines BEKes 1995 gestiegenen Interesses an Fallen- und Kühlungstechniken, stehen jetzt die erforderlichen Techniken zur Untersuchung der Quantenphänomenologie in Systemen fermionischer Atome zu Verfügung. Die Betrachtung von idealen und Spinor-Systemen erscheint hier besonders natürlich, sind doch einerseits die schwachen interatomaren Wechselwirkungen in fermionischen Systemen, aufgrund der Abwesenheit eines Kondensatpeaks mit hoher lokaler Dichte, viel geringer als für Bosonen. Andererseits verhindert die Pauli-Repulsion die Kontaktwechselwirkung in spinpolarisierten Systemen fast vollständig und vereitelt damit die Möglichkeit zu evaporativer Kühlung, so ja der statistische Ausgleich der Teilchenenergien über Stöße notwendige Voraussetzung für diese ist. Dies macht die Verwendung von Spinor-Fermionen (oder Gemischen aus Bosonen und Fermionen) zur zwingenden Voraussetzung der Erzeugung ultrakalter Fermi-Systeme.

Eine makroskopische Besetzung der $|\mathbf{k}\sigma\rangle = |\mathbf{0}\sigma\rangle$ -Zustände ist hier nicht möglich und die Konzentrationen $C_{\mathbf{0}\sigma}$ sind im thermodynamischen Grenzfall mathematisch immer Null. Die Gleichungen (3.25) und (3.29) bilden deshalb ein vollständiges Gleichungssystem, aus dem das chemische und das magnetochemische Potential sofort bestimmt werden können.

Wie in Zusammenhang mit Bosonen diskutiert, rühren die qualitativen Unterschiede zwischen der Dynamik von neutralen- und Spinor-Systemen von Unterschieden in der Gleichgewichtsthermodynamik her, weil sich am Ausdruck (2.43) bei vorliegendem Magnetfeld nur die als Gewichtungsfaktoren auftretenden Verteilungsfunktionen verändern. Dies gilt natürlich für Fermionen ebenso. Da jedoch keine Kondensation auftritt, liegt die Vermutung nahe, die Unterschiede zwischen neutralen- und Spinor-Fermionen seien bei allen Temperaturen nur quantitativ - auch wenn sie bei tiefen Temperaturen groß werden können, da das induzierte Magnetfeld anders als für Bosonen endlich bleibt und schließlich

über die Teilchenenergien dominiert. Stattdessen, so wird gezeigt, entsteht für Fermionen mit mindestens vier Spinfreiheitsgraden bei extrem niedrigen Temperaturen und hinreichend hoher Magnetisierung eine Art Bandstruktur mit Lücken, was zum Besetzungsausschluss der höheren Zeeman Niveaus führt.

Neben der formalen Invarianz von (2.43) gegenüber der Existenz eines Magnetfeldes ist jedoch eine ebensolche formale Invarianz dieser Gleichungen gegenüber der Teilchensorte zu bemerken. Dies bedeutet, dass auch in der Dynamik Unterschiede zwischen Bosonen und Fermionen auf Veränderungen der Verteilungsfunktion zurückzuführen sind. Allein bei tiefer Temperatur ist der Summand η im Nenner der Verteilungsfunktion (2.36) groß gegen die Exponentialfunktion und die Unterschiede in der Dynamik werden erheblich sein. Im Grenzfall hoher Temperatur $T \rightarrow \infty$ konvergieren Bose-Einstein- und Fermi-Dirac-Verteilung gegen die klassische Boltzmann-Statistik und damit nicht nur die thermodynamischen Eigenschaften im Gleichgewicht, sondern infolge der formalen Invarianz der Korrelationsgrößen gegenüber der Teilchensorte auch beliebig fernab desselben.

6.1 Thermodynamik

Die Berechnungen der Kapitel 3 und 4 konnten für Bosonen ($\eta = 1$), Fermionen ($\eta = -1$) und Maxwell-Boltzmann-Teilchen ($\eta = 0$) einheitlich ausgeführt werden. Es bleiben deshalb nur die Ergebnisse zu diskutieren.

6.1.1 Chemisches und magnetochemisches Potential

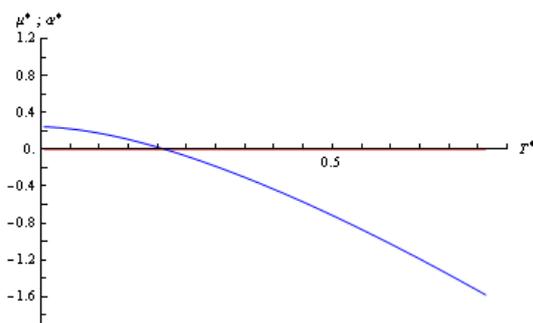


Abbildung 6.1: Temperaturabhängiges chemisches (blau) und magnetochemisches (rot) Potential für Spin $\frac{1}{2}$ -Fermionen bei fester Magnetisierung $\frac{M}{M_{\max}} = 0$.

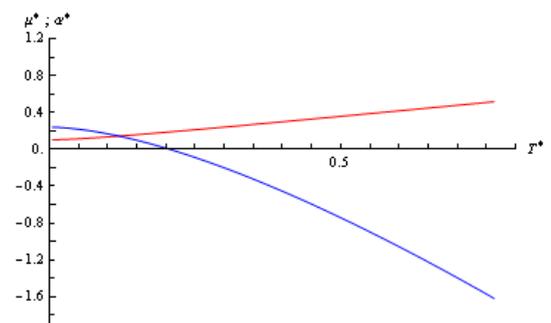


Abbildung 6.2: Temperaturabhängiges chemisches und magnetochemisches Potential für Spin $\frac{1}{2}$ -Fermionen bei fester Magnetisierung $\frac{M}{M_{\max}} = 0.3$.

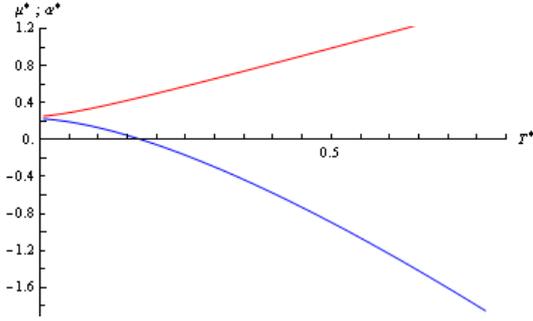


Abbildung 6.3: Temperaturabhängiges chemisches (blau) und magnetochemisches (rot) Potential für Spin $\frac{1}{2}$ -Fermionen bei fester Magnetisierung $\frac{M}{M_{\max}} = 0.7$.

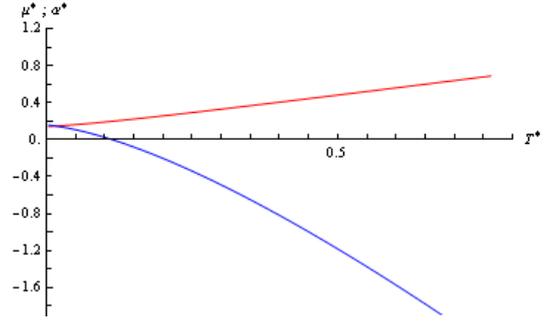


Abbildung 6.4: Temperaturabhängiges chemisches und magnetochemisches Potential für Spin $\frac{5}{2}$ -Fermionen bei fester Magnetisierung $\frac{M}{M_{\max}} = 0.7$.

Wie für Bosonen in der Gasphase steigt das magnetochemische Potential im Fermionensystem fast linear mit der Temperatur an.

Die physikalische Ursache ist dieselbe, die dem Anstieg der kritischen Temperatur in einem System aus Bosonen zugrunde liegt: Das innere Magnetfeld, welches durch eine verstärkte Besetzung der durch den Zeeman-Effekt energetisch begünstigten Spinzustände entsteht, führt zu zusätzlich energetischer Begünstigung dieser Zustände. Die Wechselwirkung mit dem induzierten Feld entspricht einer effektiven Attraktion. Sie erhöht Besetzungswahrscheinlichkeit pro Besetzung eines Spinzustandes, analog wie es für Bosonen durch die Bose-Einstein-Statistik für vollständige Quantenzustände gegeben ist.

Die Gleichung (D.8) zeigt, dass das Maxwell-Boltzmann-Gas bei allen Temperaturen $B(T) \propto T$ erfüllt. Dies zeigt, dass die Abweichungen bei tiefen Temperaturen alleinige Konsequenz der Fermi-Dirac-Statistik ist.

Im Unterschied zum bosonischen Fall, wirkt in Fermionensystemen auch am Temperaturnullpunkt ein Magnetfeld. Dies führt wie sich zeigt zu starken quantitativen Unterschieden in der Dynamik zwischen neutralen- und Spinor-Fermionen bei niedriger Temperatur, weil dann der Zeeman-Term $\sigma\alpha$ im Hamiltonoperator im Vergleich zu den sämtlich unterhalb der Fermi-Energie $\varepsilon_F = \mu(T=0)$ liegenden Einteilchenenergien $\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}$ an Einfluss gewinnt. Abb. 6.3 zeigt einen Fall stark polarisierter Spin $\frac{1}{2}$ -Fermionen, in dem die Zeeman-Energie $\pm\frac{\alpha}{2}$ bei $T=0$ den halben Wert der Fermi-Energie $\mu(T=0)$ hat. Sie ist deshalb in Folge der durch das Paulische Ausschlussprinzip erzwungenen Besetzungsverteilung gleich der mittleren Energie pro Teilchen.

Diese Betrachtungen zeigen, dass in einem System aus Spinor-Fermionen die Pauli-Abstoßung durch Wechselwirkung mit dem induzierten Magnetfeld teilweise kompensiert wird: Für $T \rightarrow 0$ kommt der $\sigma = F$ -Zustand in einem stark polarisierten Fermionensystem nahe an die Schwelle zur BEK. Mithilfe von Feshbach-Resonanzen kann die Wechselwir-

kung in Quantengasen manipuliert werden, so dass bereits BEKe in Fermionensystemen erzeugt werden konnten. Die Kondensationstemperatur wird bei gleicher Wechselwirkung in Folge der Nähe von chemischem und magnetochemischem Potential bei $T = 0$ in Spinor-Fermionen deutlich höher als in einem System neutraler Fermionen liegen.

6.1.2 Magnetische Suszeptibilität

Für Fermionen gilt selbst bei beliebig tiefen Temperaturen $C_\sigma = 0 \forall \sigma$. Deshalb können die Gleichungen (3.25) und (3.29) schon für beliebige kleine Temperaturen sinnvoll entwickelt werden. Mit analogem Vorgehen wie für Bosonen folgt für Fermionen anstatt von (3.82) die für alle Temperaturen gültige Gleichung:

$$\alpha = \alpha(T^* = 0) + \frac{3Tk_B M^*}{F(F+1)} \frac{\zeta_{\frac{3}{2}}\left(-e^{\frac{\mu}{k_B T}}\right)}{\zeta_{\frac{1}{2}}\left(-e^{\frac{\mu}{k_B T}}\right)} \xrightarrow{T \rightarrow \infty} \alpha(T = 0) + \frac{3k_B T M^*}{F(F+1)} \quad (6.1)$$

Das Curie-Verhalten gilt deshalb für Fermionen bei allen Temperaturen T in ebenso guter Näherung wie für Bosonen bei $T' = T + T_C^F$. Auch zeigt der Vergleich der Abb. 6.3 und 6.4, dass Fermionen bei gleicher Temperatur in besserer Näherung einem Curie-Verhalten folgen.

6.1.3 Tieftemperaturgrenzfall

Die Diskussion in Abschnitt 6.1.1 legte nahe, dass die Wechselwirkung mit dem induzierten Magnetfeld eine effektive Attraktion zwischen den Teilchen bewirkt. Dieser Effekt ist besonders bei $T = 0$ relevant. Es ist deshalb von Interesse, wie die Fermikugel von Spinor-Fermionen bei $T = 0$ zusammen schrumpft. Dabei zeigt sich, dass die Interpretation des chemischen Potentials bei $T = 0$ nur im Falle von Spin $\frac{1}{2}$ Fermionen sinnvoll als Fermi-Energie interpretiert werden kann. Für Fermionen mit höherem Spin treten kritische Magnetisierungen auf, bei denen ein sukzessiver Besetzungsausschluss aller höheren Zeeman-Niveaus, bis auf die untersten beiden erfolgt. Dies kann als eine Art Bandstruktur, mit durch Energielücken getrennten Besetzungsbändern verstanden werden. Dies führt zu qualitativen Veränderungen im chemischen Potential und im induzierten Magnetfeld und ebenso im dynamischen Strukturfaktor, wie sich später zeigt. Im Folgenden werden analytische Resultate für das chemische Potential und die magnetische Suszeptibilität bei $T = 0$ abgeleitet.

Nach [63] gilt:

$$\zeta_\nu\left(-e^x\right) \xrightarrow{|x| \rightarrow \infty} \begin{cases} \frac{-x^\nu}{\Gamma(\nu+1)}; & x > 0 \\ 0; & x < 0 \end{cases} \quad (6.2)$$

Mit $x := \frac{\mu + \alpha\sigma}{k_B T}$ gilt für $\mu|_{T=0} + \alpha|_{T=0}\sigma > 0$:

$$\begin{aligned} \lim_{T \rightarrow 0} T^\nu \zeta_\nu \left(-e^{\frac{\mu + \alpha\sigma}{k_B T}} \right) &= \left(\frac{\mu|_{T=0} + \alpha|_{T=0}\sigma}{k_B} \right)^\nu \lim_{x \rightarrow \infty} \left[x^{-\nu} \zeta_\nu \left(-e^x \right) \right] \\ &= \left(\frac{\mu|_{T=0} + \alpha|_{T=0}\sigma}{k_B} \right)^\nu \frac{\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{-x^\nu}{\Gamma(\nu+1)}}{\lim_{x \rightarrow \infty} x^\nu} \\ &= \left(\frac{\mu|_{T=0} + \alpha|_{T=0}\sigma}{k_B} \right)^\nu \frac{-1}{\Gamma(\nu+1)} \end{aligned} \quad (6.3)$$

Zusammen mit der Definition

$$c := n \Gamma \left(\frac{5}{2} \right) \left(\frac{2\pi \hbar^2}{m} \right)^{\frac{5}{2}} \quad (6.4)$$

und den Abkürzungen $\mu_0 := \mu|_{T=0}(M^*)$ und $\alpha_0 := \alpha|_{T=0}(M^*)$ gehen (3.25) und (3.29) bei $T = 0$ und $M \neq \leq M^{(i)}$ in folgende Form über:

$$\sum_{\sigma=-F+i}^F (\mu_0 + \alpha_0 \sigma)^{\frac{3}{2}} = c \quad (6.5)$$

$$\sum_{\sigma=-F+i}^F \sigma (\mu_0 + \alpha_0 \sigma)^{\frac{3}{2}} = M^* c \quad (6.6)$$

Darin bezeichnet i den maximalen Wert von σ , für den $\mu|_{T=0} + \alpha|_{T=0}(-F + \sigma) < 0$ gilt. Durch Einsetzen der Bedingungen $\mu = (F - i + 1)\alpha$ in (6.5) und (6.6) folgen die kritischen Magnetisierungen

$$M_{\text{cr}}^{(i)} = \frac{H_{2F-i+1}^{(-1-r)}}{H_{2F-i+1}^{(-r)}} - F \quad (6.7)$$

durch die mit $M^{(i-1)} \leq M \leq M^{(i)}$ der Wert von i bei gegebener Magnetisierung festgelegt ist.

Es gilt $M^{(2F)} = F = M_{\text{max}}$. Folglich wird Veränderung der Magnetisierung von 0 bis 1 bei $T = 0$ die Besetzung aller Spinzustände, außer den letzten beiden sukzessive unterdrückt. Für Spin $\frac{1}{2}$ -Atome gilt deshalb bei allen Magnetisierungen $i = 0$. Dieser Fall wird zuerst untersucht: Im Spezialfall $M^* = 0 \rightarrow \alpha = 0$ ist die zweite Gleichung trivial erfüllt und die erste Gleichung liefert mit $\Gamma\left(\frac{5}{2}\right) = \frac{3\sqrt{\pi}}{4}$ den bekannten Ausdruck für die Fermi-Energie:

$$\varepsilon_F^0 := \varepsilon_F(M^* = 0) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{6\pi^2 n}{2F+1} \right)^{\frac{2}{3}} \quad (6.8)$$

Speziell für ein Spin- $\frac{1}{2}$ -Atomgas (z.B. ^{47}Ag) ohne Zwei- und (Mehr)teilchenwechselwirkungen vereinfachen sich (6.5) und (6.6) zu:

$$\left(\mu_0 + \frac{\alpha_0}{2}\right)^{\frac{3}{2}} + \left(\mu_0 - \frac{\alpha_0}{2}\right)^{\frac{3}{2}} = c \quad (6.9)$$

$$\left(\mu_0 + \frac{\alpha_0}{2}\right)^{\frac{3}{2}} - \left(\mu_0 - \frac{\alpha_0}{2}\right)^{\frac{3}{2}} = 2M^*c \quad (6.10)$$

Diese Gleichungen können analytisch gelöst werden:

$$\varepsilon_F = \frac{\varepsilon_F^0}{2} \left[(1 + 2M^*)^{\frac{2}{3}} + (1 - 2M^*)^{\frac{2}{3}} \right] \quad (6.11)$$

$$\alpha = \varepsilon_F^0 \left[(1 + 2M^*)^{\frac{2}{3}} - (1 - 2M^*)^{\frac{2}{3}} \right] \quad (6.12)$$

Im Folgenden werden die Ergebnisse allein für Spin- $\frac{1}{2}$ -Atomgase diskutiert. In Kapitel 7, wird der besonders interessante Fall fermionischer Atomgase mit mehr als zwei Spinfreiheitsgraden kurz diskutiert.

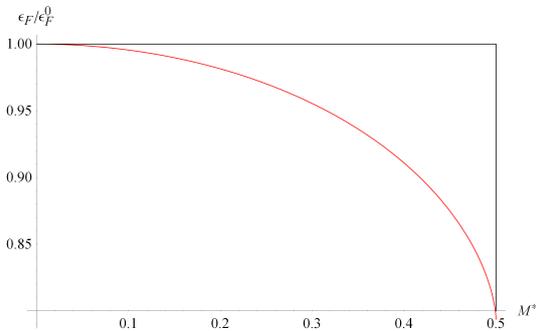


Abbildung 6.5: Fermi-Energie idealer Spin $\frac{1}{2}$ -Fermionen als Funktion der Magnetisierung M^* . $M^* = 0$ entspricht einem vollständig polarisierten System.

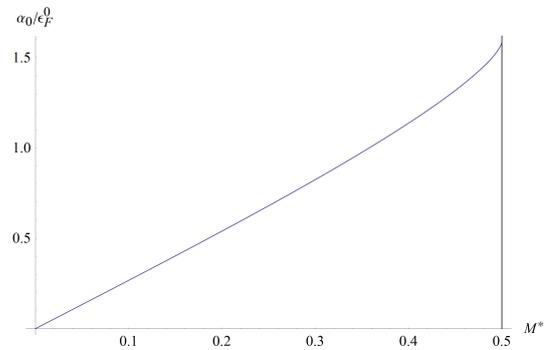


Abbildung 6.6: Innere magnetische Suszeptibilität: Reduziertes Magnetfeld α/ε_F^0 als Funktion der reduzierten Magnetisierung $M^* = \frac{M}{n\mu_B g_F}$

Abb. 6.5 zeigt, dass sich die Fermi-Energie schwach polarisierter Spin $\frac{1}{2}$ Atomgase nur wenig mit der Magnetisierung verändert. Dies zeigt, dass die übliche Voraussetzung einer vom Magnetfeld unabhängigen Fermi-Energie eine gute Näherung darstellt. Im Bereich stark polarisierter Fermionen (d.h. für starke Magnetfelder) gilt dies jedoch nicht mehr. Im vollständig polarisierten, nichtwechselwirkenden Elektronengas, beträgt sie nur genau

80% der normalen Fermi-Energie spinentarteter Fermionen. Dies zeigt, dass die Fermikugel in Folge der Wechselwirkung mit dem induzierten Magnetfeld schrumpft, und bestätigt damit die Erwartung, dass die Wechselwirkung mit dem induzierten Magnetfeld eine effektive Attraktion bewirkt.

Abb. 6.6 zeigt, dass die innere magnetische Suszeptibilität idealer Fermionen bei $T = 0$ fast konstant ist. Erst das fast vollständig polarisierte System zeigt einen leichten Sättigungseffekt.

6.2 Spektralfunktionen

6.2.1 Dichte- und Strom-Spektralfunktionen

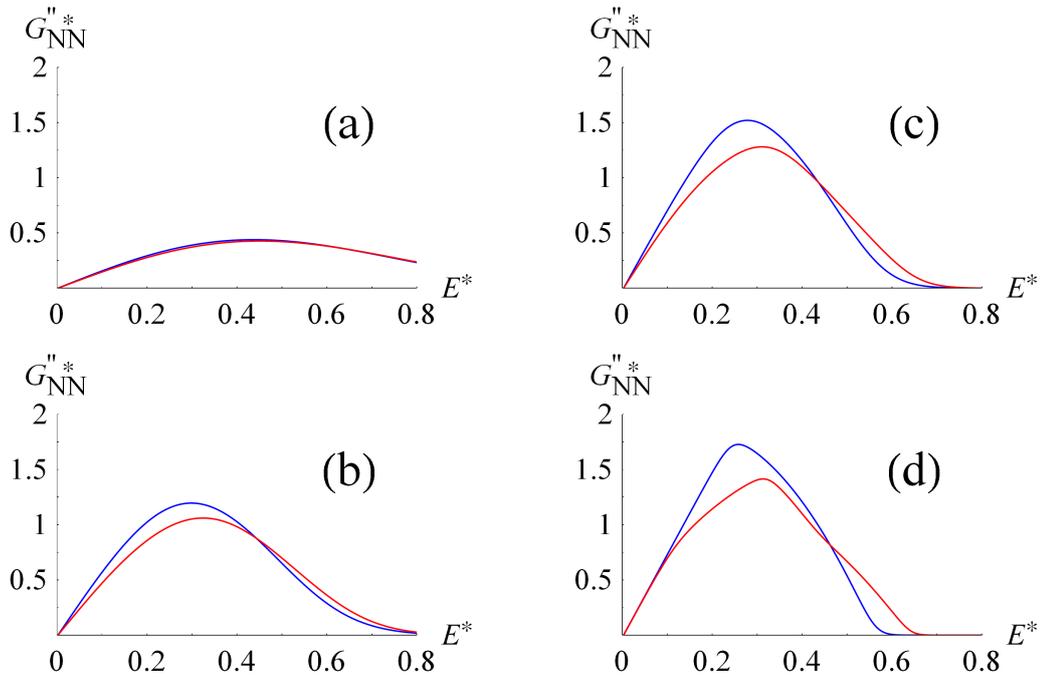


Abbildung 6.7: Energieabhängige Teilchenzahl-Spektralfunktion $G''_{NN+}^* := \frac{\epsilon_u}{n} G''_{N,N+}$ für Spin- $\frac{1}{2}$ -Fermionen bei fester Magnetisierung $\frac{M}{M_{\max}} = 0$ (blau) und $\frac{M}{M_{\max}} = 0,7$ (rot) sowie fester Anregungswellenzahl $q^* = 0,4$: Temperatur $T^* = 0,491$ (a), $0,114$ (b), $0,055$ (c), $0,017$ (d).

Die Abb. 6.7 und 6.8 zeigen die exakte Teilchenzahl-Spektralfunktion und den transversalen Anteil der Teilchenstrom-Spektralfunktion homogener neutraler und Spinor-Fermionen in Abhängigkeit der Anregungsenergie E^* bei festem Anregungsimpuls und verschiedenen Temperaturen.

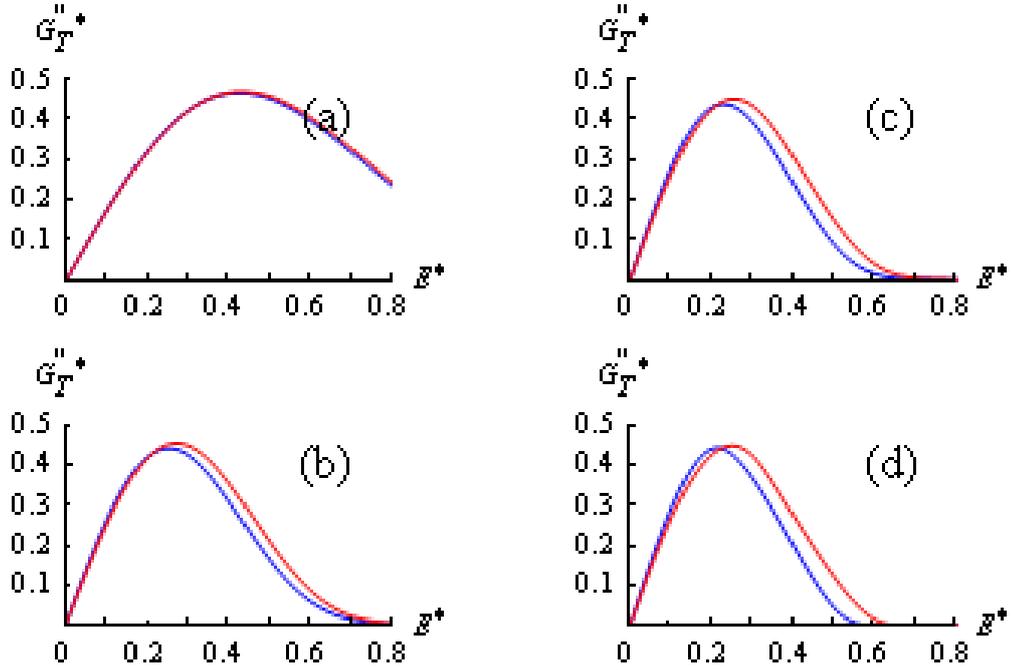


Abbildung 6.8: Energieabhängige Transversale Teilchenstrom-Teilchenstrom-Spektralfunktion $G''_{JJ^*} := \frac{2m}{n} G''_{JJ^*}$ für Spin 1-Bosonen. Parameter wie in (6.7).

Der Unterschied zwischen neutralen und Spinor Fermionen ist gering, nimmt jedoch hin zu tiefen Temperaturen zu, weil dann, gemäß der in Abschnitt 6.1.1 ausgesprochenen Erwartung, die Zeeman-Energie Dominanz gegenüber der thermischen Energie gewinnt. Im Unterschied zu Bosonen, wo die erhöhte Kondensationstemperatur einer effektiven Verschiebung des Spinor-Systems hin zu tieferen Temperaturen entspricht, liegt bei Fermionen der Fall umgekehrt. Im transversalen Anregungsimpulsspektrum (Abb. 6.8) ist für Spinor-Fermionen eine geringe „Aufweichung“ zu erkennen, was einer Verschiebung hin zu höheren Temperaturen entspricht. Dies liegt darin begründet, dass der Zeeman-Term die Entartung der Zustände aufhebt und deshalb Energie in einem breiteren Frequenzbereich absorbiert werden kann. Da Fermionen kein Kondensat bilden, verschwindet das transversale Teilchenstromspektrum anders als für Bosonen bei tiefen Temperaturen nicht. Interessant ist, dass die Fläche unter den Graphen für Spinor-Fermionen größer ist als für neutrale Fermionen und damit die Gesamtabsorptionswahrscheinlichkeit für Transversalimpulsquanten zunimmt. Für hohe Temperaturen konvergieren sowohl Fermi-Dirac-, als auch die Bose-Einstein-Verteilungsfunktion gegen die klassische Maxwell-Boltzmann-Verteilungsfunktion. Wegen der formalen Invarianz der Spektralfunktion gegenüber der Existenz eines Magnetfeldes konvergieren damit auch diese gegen das klassische Resultat. In der Folge weisen Fermionen im Grenzfall hoher Temperatur, unabhängig von der Magnetisierung, dasselbe Absorptionsvermögen für Dichteanregungen wie Bosonen auf (die Argumentation gilt natürlich für Teilchenstromanregungen analog).

6.2.2 Tieftemperaturgrenzfall

Anders als für Bosonen ist der $T = 0$ -Grenzfall für Fermionen nicht sofort aus (4.26) ersichtlich. Andererseits ist die $T = 0$ -Teilchendichte-Spektralfunktion für $M^* = 0$ ein bekanntes Ergebnis [58, 56]. Es wird deshalb im Folgenden der nichttriviale $T \rightarrow 0$ Grenzübergang zur Kontrolle der bisherigen Ergebnisse ausgeführt. Mit Hilfe von (3.25) (sowie $\sum_{\sigma=-F}^F C_{0\sigma} = 0$ und $\eta = -1$ für Fermionen) kann (4.26) mit $M^* = 0 \rightarrow \alpha = 0$ für $T = 0$ wie folgt geschrieben werden:

$$G''_{N,N^+}(\mathbf{q}, E) = \frac{-(2F+1)m^{\frac{3}{2}}k_B}{2\sqrt{\pi\varepsilon_q}(2\pi\hbar^2)^{\frac{3}{2}}} \times \lim_{T \rightarrow 0} \left(T \left[\zeta_1 \left(-e^{\frac{\mu}{k_B T}} e^{-\frac{(E-\varepsilon_q)^2}{4\varepsilon_q k_B T}} \right) - \zeta_1 \left(-e^{\frac{\mu}{k_B T}} e^{-\frac{(E+\varepsilon_q)^2}{4\varepsilon_q k_B T}} \right) \right] \right) \quad (6.13)$$

Mit (E.23) kann der Grenzwert umgeschrieben werden in:

$$\frac{\lim_{T \rightarrow 0} \ln \left(\frac{1 + e^{\frac{\mu}{k_B T}} e^{-\frac{(E+\varepsilon_q)^2}{4\varepsilon_q k_B T}}}{1 + e^{\frac{\mu}{k_B T}} e^{-\frac{(E-\varepsilon_q)^2}{4\varepsilon_q k_B T}} \right)}{\lim_{T \rightarrow 0} \frac{1}{T}} \quad (6.14)$$

Offensichtlich divergieren Zähler und Nenner bestimmt, so dass der Satz von l'Hospital anwendbar ist. Nach Differentiation von Zähler und Nenner nach der Temperatur lautet der Grenzwert:

$$\lim_{T \rightarrow 0} \left[\frac{\frac{\partial \left(\frac{\mu}{k_B T} - \frac{(E+\varepsilon_q)^2}{4k_B T \varepsilon_q} \right)}{\partial T}}{-\frac{1}{T^2}} \frac{e^{\frac{\mu}{k_B T}} e^{-\frac{(E+\varepsilon_q)^2}{4k_B T \varepsilon_q}}}{1 + e^{\frac{\mu}{k_B T}} e^{-\frac{(E+\varepsilon_q)^2}{4k_B T \varepsilon_q}}} - \frac{\frac{\partial \left(\frac{\mu}{k_B T} - \frac{(E-\varepsilon_q)^2}{4k_B T \varepsilon_q} \right)}{\partial T}}{-\frac{1}{T^2}} \frac{e^{\frac{\mu}{k_B T}} e^{-\frac{(E-\varepsilon_q)^2}{4k_B T \varepsilon_q}}}{1 + e^{\frac{\mu}{k_B T}} e^{-\frac{(E-\varepsilon_q)^2}{4k_B T \varepsilon_q}}} \right] \quad (6.15)$$

Damit die Teilchenzahlidentität (3.25) erfüllbar ist, muss $\mu(T) = \mu(T=0) + \mathcal{O}(T^2)$ gelten.

Im Grenzfall $T = 0$ ist deshalb von $\frac{\partial \mu(T)}{\partial T}$ nur der Term $\frac{-\mu(T=0)}{k_B T^2}$ relevant. Damit lautet (6.15):

$$+ \left[\left(\frac{(E-\varepsilon_q)^2}{4k_B \varepsilon_q} - \frac{\mu(T=0)}{k_B} \right) \lim_{T \rightarrow 0} \frac{1}{e^{-\frac{\mu}{k_B T}} e^{\frac{(E-\varepsilon_q)^2}{4k_B T \varepsilon_q}} + 1} \right] + \left[\left(\frac{-(E+\varepsilon_q)^2}{4k_B \varepsilon_q} + \frac{\mu(T=0)}{k_B} \right) \lim_{T \rightarrow 0} \frac{1}{e^{-\frac{\mu}{k_B T}} e^{\frac{(E+\varepsilon_q)^2}{4k_B T \varepsilon_q}} + 1} \right] \quad (6.16)$$

Jetzt kann der Grenzwert leicht ausgeführt werden: Für $\frac{\mu(T=0)}{k_B} > \frac{(E+\varepsilon_q)^2}{4k_B \varepsilon_q}$ ergibt der Grenzwert in beiden Fällen 1 und (6.16) reduziert sich zu $-\frac{E}{k_B}$. Für $\frac{(E-\varepsilon_q)^2}{4k_B \varepsilon_q} < \frac{\mu(T=0)}{k_B} < \frac{(E+\varepsilon_q)^2}{4k_B \varepsilon_q}$

verschwindet der zweite Grenzwert, während der Erste 1 ergibt, so dass $\frac{(E-\varepsilon_q)^2}{4k_B\varepsilon_q} - \frac{\mu(T=0)}{k_B}$ verbleibt. Für $\mu < \frac{(E-\varepsilon_q)^2}{4k_B\varepsilon_q}$ verschwinden schließlich beide Grenzwerte. Rückeinsetzen dieser Grenzwerte in (6.13) ergibt mit $\varepsilon_F := \mu(T=0)$ das bekannte Ergebnis [56] für $T=0$:

$$G''_{N,N^+}(\mathbf{q}, E) = \frac{(2F+1)m^{\frac{3}{2}}}{2\sqrt{\pi\varepsilon_q}(2\pi\hbar^2)^{\frac{3}{2}}} \begin{cases} E & E \leq |\varepsilon_q - 2\sqrt{\varepsilon_q\varepsilon_F}| \\ \varepsilon_F - \frac{(E-\varepsilon_q)^2}{4\varepsilon_q} & |\varepsilon_q - 2\sqrt{\varepsilon_q\varepsilon_F}| \leq E \leq \varepsilon_q + 2\sqrt{\varepsilon_q\varepsilon_F} \\ 0 & E \geq \varepsilon_q + 2\sqrt{\varepsilon_q\varepsilon_F} \end{cases} \quad (6.17)$$

Ausgehend von (4.26) kann dieses bekannte Ergebnis mithilfe von (6.2) und (3.25) leicht auf Spinor-Fermionen erweitert werden. Dann gilt:

$$G''_{N,N^+}(\mathbf{q}, E) = \frac{m^{\frac{3}{2}}}{2\sqrt{\pi\varepsilon_q}(2\pi\hbar^2)^{\frac{3}{2}}} \left[\sum_{\sigma=-F+i}^F \Theta\left(\mu + \alpha\sigma - \frac{(E + \varepsilon_{\mathbf{q}})^2}{4\varepsilon_{\mathbf{q}}}\right) \left(\mu + \alpha\sigma - \frac{(E + \varepsilon_{\mathbf{q}})^2}{4\varepsilon_{\mathbf{q}}}\right) - \sum_{\sigma=-F+i}^F \Theta\left(\mu + \alpha\sigma - \frac{(E - \varepsilon_{\mathbf{q}})^2}{4\varepsilon_{\mathbf{q}}}\right) \left(\mu + \alpha\sigma - \frac{(E - \varepsilon_{\mathbf{q}})^2}{4\varepsilon_{\mathbf{q}}}\right) \right] \quad (6.18)$$

Darin konnte gleich $\sum_{\sigma=-F}^F$ durch $\sum_{\sigma=-F+i}^F$ ersetzt werden, weil die entsprechenden Terme für $\mu + \alpha\sigma > 0$ bei allen Energien wegfallen. Die Teilchendichte-Spektralfunktionen (und damit auch der Strukturfaktor) von Spinor-Fermionen, weist also bei $T=0$ eine im Vergleich zu spinpolarisierten Fermionen vielfach kompliziertere Struktur auf. Hinzu kommt der für Fermionen mit $F > \frac{1}{2}$ gegebene sukzessive Ausschluss der höheren Zeeman-Zustände, der sowohl in der Spektralfunktion selbst, als auch in den enthaltenen thermodynamischen Größen qualitative Veränderungen bewirkt.

Kapitel 7

Inhomogene Systeme

Bisher wurden freie, ideale Spinor-Quantengase hinsichtlich ihrer statischen und dynamischen Eigenschaften untersucht. Dabei konnten die wesentlichen Charakteristika solcher Systeme eingesehen werden. Da (Spinor-)BEKe aus verdünnten Quantengasen allein im lokalen Minimum eines (elektrischen) Feldes erzeugt werden können, wird untersucht, welche Modifikationen die bisherigen Resultate durch eine solche Falle erfahren. Als lokales Minimum kann das Potential aufgrund der üblicherweise sehr geringen Ausdehnung der Systeme in exzellenter Näherung durch ein dreidimensionales harmonisches Oszillatorpotential beschrieben werden [2, 64]:

$$U(\mathbf{x}) = \frac{m}{2} \sum_{i=1}^3 \omega_i^2 x_i^2 \quad (7.1)$$

Darin ist ω_i die Kreisfrequenz der Falle in x_i -Richtung.

7.1 Statische Eigenschaften

Die folgenden Betrachtungen erfolgen im Rahmen einer semiklassischen Näherung. Die Vorstellung ist dabei, das System in Zellen unterteilt zu denken, die einerseits so klein sind, dass für sie überall das Fallenpotential $U(\mathbf{x})$ ihrer Schwerpunktkoordinate \mathbf{x} angenommen werden kann, andererseits aber hinreichend groß sind, um sie in einem thermodynamischen Sinne als makroskopisch begreifen zu können¹.

¹Diese Annahmen haben ein vertrautes Analogon, welches in der klassischen Hydrodynamik durch das Flüssigkeitsteilchen gegeben ist. Jenes wird dort ebenfalls makroskopisch im thermodynamischen Sinne und gleichzeitig als Massenpunkt im mechanischen Sinne behandelt.

Am Beispiel von ^{87}Rb Atomen bei einer typischen Temperatur von $T = 1\mu\text{K}$ im Zentrum einer isotropen Falle der typischen Frequenz $\omega = 2\pi \cdot 100\text{Hz}$ zeigt sich, dass die durch das Fallenpotential bewirkte Veränderung der potentiellen Energie entlang einer thermischen De Broglie-Wellenlänge aufgrund der üblichen Flachheit der Fallen gegenüber der mittleren Energie pro Teilchen vernachlässigbar ist:

$$\lambda \approx 0.2\mu\text{m} \rightarrow \Delta E_{\text{pot}} = U(x = \lambda) - U(x = 0) \approx 1.1 \cdot 10^{-33}\text{J} \implies \frac{\Delta E_{\text{pot}}}{E} \approx 6 \cdot 10^{-5} \quad (7.2)$$

Jede dieser *lokal* homogenen und isotropen Zellen wird dann durch einen semiklassischen Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \mu + U(\mathbf{x}) \quad (7.3)$$

beschrieben, der sowohl vom Teilchenort als auch von der Schwerpunktskoordinate der mechanisch infinitesimalen Zelle abhängt.²

7.1.1 Identitäten für Teilchenzahl und Magnetisierung

Um das Phasendiagramm, die Kondensatdichten und schließlich das chemische und magnetochemische Potential berechnen zu können, ist wieder ein Gleichungssystem aus $2F+3$ Gleichungen aufzustellen. Dies erfolgt in Analogie zum Vorgehen in Kapitel 3.

Zuerst wird untersucht, wie die Identitäten für Teilchenzahl (3.25) und Magnetisierung (3.29) für ideale inhomogenen Systeme im Fallenpotential (7.1) lauten.

Die Wahrscheinlichkeit dafür, dass sich ein Teilchen am Ort \mathbf{x} befindet und zudem im $|\mathbf{k}\sigma\rangle$ ist, ist bei Vernachlässigung der Orts-Impuls-Unschärfe durch die quasiklassische Bose/Fermi-Verteilung gegeben. Betrachte hierzu:

$$\begin{aligned} h_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}\sigma}(\mathbf{x}) &= \langle \mathbf{k}\sigma | \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \mu \hat{1} - \frac{g_F \mu_B}{\hbar} \hat{F}_z + U(\mathbf{x}) | \mathbf{k}\sigma \rangle = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu - \alpha\sigma + U(\mathbf{x}) \\ &\approx \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} - \mu + U(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (7.4)$$

Darin ist $\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + E_0 - \alpha\sigma$ die Einteilchendispersionsrelation und $E_0 = \frac{1}{2}\hbar(\omega_1 + \omega_2 + \omega_3) =: \frac{3}{2}\hbar\bar{\omega}$ die Grundzustandsenergie eines Teilchens im dreidimensionalen harmonischen Oszillatorpotential. Bei einer typischen mittleren Ausdehnung der Falle von $10\mu\text{m}$, einer

²Physikalisch bedeutet die semiklassische Näherung also die Vernachlässigung der Orts-Impuls-Unschärfe, was mit $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ dem klassischen Limes $\hbar \rightarrow 0$ entspricht. Eine rein klassische Näherung wäre aber sicher nicht sinnvoll, weil der Unterschied von Bose-Einstein-Statistik zur klassischen Boltzmann-Statistik bei tiefen Temperaturen wesentlich ist, so dass der Limes erst nach Ansetzen der Bose-Einstein-Statistik durchzuführen ist.

Fallenfrequenz von $\omega_i = 2\pi \cdot 100\text{Hz}$ und einer Arbeitstemperatur von $T = 1\mu\text{K}$ ist die Grundzustandsenergie E_0 um mehr als zwei Größenordnungen kleiner als die mittlere kinetische Energie eines einzelnen Teilchens, so dass ihre künstliche Addition in einem Vielteilchensystem gänzlich unproblematisch ist³. Mit (7.4) und (2.36) lautet die quasiklassische Verteilungsfunktion:

$$n_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{x}) \approx \frac{1}{\exp\left[\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} - \mu - \frac{m}{2}\sum_i \omega_i^2 x_i^2)\right] - \eta} \quad (7.5)$$

Es sei ausdrücklich betont, dass das Fallenpotential nicht Fourier-transformiert werden kann, da es die Schwerpunkte der Subsysteme am Ort \mathbf{x} betrifft. Die Teilchenzahlidentität lautet:

$$N = \sum_{\sigma=-F}^F \int d^3x \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} n_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{x}) \quad (7.6)$$

Darin wurde, anstatt wie im homogenen Fall, gleich über die möglichen Impulse integriert, weil die Impulzzustände im Grenzfall $\hbar \rightarrow 0$ natürlich kontinuierlich liegen.

Mit $C_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{x}) := \frac{n_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{x})}{N}$ gilt:

$$1 = \sum_{\sigma=-F}^F \int d^3x C_{\mathbf{0}\sigma}(\mathbf{x}) + \sum_{\sigma=-F}^F \int d^3x \int_{\mathbf{k}\neq\mathbf{0}} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} C_{\mathbf{k}\sigma} \quad (7.7)$$

Nach Ausführen des \mathbf{k} -Integrals wie in Abschnitt 3.2.1, folgt mit den Abkürzungen $\lambda'_\sigma(\mathbf{x}) := \lambda_\sigma \exp\left[-\beta(E_0 + \frac{m}{2}\sum_i \omega_i^2 x_i^2)\right]$ und $\lambda'_\sigma := \lambda'_\sigma(\mathbf{x} = 0)$:

$$C_{\mathbf{k}\neq\mathbf{0}\sigma} = \frac{1}{\eta N \lambda_T^3} \int d^3x \zeta_{\frac{3}{2}}(\eta \lambda'_\sigma(\mathbf{x})) \quad (7.8)$$

Es ist zweckmäßig zuerst auf die Bestimmung der Gesamtkondensatdichte $C_{\mathbf{0}\sigma} := \int d^3x C_{\mathbf{0}\sigma}(\mathbf{x})$ hinzuarbeiten. Später kann aus dieser, Dank Kenntnis der Grundzustandswellenfunktion im harmonischen Potential, die lokale BEK-Dichte $C_{\mathbf{0}\sigma}(\mathbf{x})$ ermittelt werden.

$$1 - \sum_{\sigma=-F}^F C_{\mathbf{0}\sigma} = \frac{1}{\eta N \lambda_T^3} \sum_{\sigma=-F}^F \int d^3x \zeta_{\frac{3}{2}}(\eta \lambda'_\sigma(\mathbf{x})) \quad (7.9)$$

Das enthaltene Integral kann durch Vertauschen von Integral und Summe nach Verwendung von (E.21) mithilfe von (E.27) leicht gelöst werden:

$$\int d^3x \zeta_{\frac{3}{2}}(\eta \lambda'_\sigma(\mathbf{x})) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\eta^l e^{l\beta(\mu + \alpha\sigma - E_0)}}{l^{\frac{3}{2}}} \prod_{i=1}^3 \int_{-\infty}^{\infty} dx_i e^{-l\beta \frac{m}{2} \omega_i^2 x_i^2} = \left(\frac{2\pi}{\beta m \omega^2}\right)^{\frac{3}{2}} \zeta_3(\eta \lambda'_\sigma) \quad (7.10)$$

³In einer quantenmechanischen Rechnung träte die Grundzustandsenergie natürlich automatisch auf, was nochmals reflektiert, dass die semiklassische Betrachtung nur für hinreichend flache Fallen eine gute Näherung sein kann.

Hierbei wurde das geometrische Mittel der Fallenfrequenzen $\overline{\omega^2} = (\omega_1^2 \omega_2^2 \omega_3^2)^{\frac{1}{3}}$ eingeführt. Damit lautet die Teilchenzahlidentität

$$1 - \sum_{\sigma=-F}^F C_{\mathbf{0}\sigma} = \frac{1}{\eta N \lambda_T^3} \left(\frac{2\pi}{\beta m \overline{\omega^2}} \right)^{\frac{3}{2}} \sum_{\sigma=-F}^F \zeta_3(\eta \lambda'_\sigma) \quad (7.11)$$

und kann nach Verwendung von (3.24) in folgender Form geschrieben werden:

$$1 - \sum_{\sigma=-F}^F C_{\mathbf{0}\sigma} = \frac{1}{\eta N} \left(\frac{k_B^2 T^2}{\hbar^2 \overline{\omega^2}} \right)^{\frac{3}{2}} \sum_{\sigma=-F}^F \zeta_3(\eta \lambda'_\sigma) \quad (7.12)$$

Ganz analog kann die Identität der Magnetisierung

$$M^* = \int d^3x \sum_{\sigma=-F}^F \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sigma n_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{x}) \quad (7.13)$$

in folgenden Ausdruck umgeschrieben werden:

$$M^* - \sum_{\sigma=-F}^F \sigma C_{\mathbf{0}\sigma} = \frac{1}{\eta N} \left(\frac{k_B^2 T^2}{\hbar^2 \overline{\omega^2}} \right)^{\frac{3}{2}} \sum_{\sigma=-F}^F \sigma \zeta_3(\eta \lambda'_\sigma) \quad (7.14)$$

7.1.2 Gross-Pitaevskii-Gleichungen

Die Gross Pitaevskii-Gleichungen sind durch (B.50) gegeben und lauten

$$\left(E_0 - \mu - \alpha \sigma \right) n_{\mathbf{0}\sigma} = 0 \quad (7.15)$$

Durch diese Gleichungen ist zusammen mit (7.11) und (7.14) das gesuchte vollständige Gleichungssystem für ideale, magnetisierte Bose-Gase in einer harmonischen Falle gegeben. Wie für den homogenen Fall ist es zweckmäßig, zuerst Lösungen der Gross-Pitaevskii-Gleichungen zu ermitteln, um sie anschließend in (7.12) und (7.14) einzusetzen.

Nach Transformation $\mu' := \mu - E_0$ sind die Gross-Pitaevskii-Gleichungen formal äquivalent zu (3.30). Die Lösungen sind also dieselben wie in (3.2.2), wobei überall μ durch μ' zu ersetzen ist. Sie lauten:

Gasphase:

$$C_{\mathbf{0}-F} = \dots = C_{\mathbf{0}F-1} = C_{\mathbf{0}F} = 0 \quad (7.16)$$

ferromagnetische Phase:

$$C_{0-F} = \dots = C_{0F-2} = C_{0F-1} = 0; \mu = E_0 - \alpha F \quad (7.17)$$

antiferromagnetische Phase:

$$\alpha = 0; \mu = E_0 \quad (7.18)$$

7.1.3 Kritische Temperatur

Es liegt jetzt ebenso wie in Abschnitt 3.3 ein teilweise gelöstes, vollständiges System aus $2F + 3$ Gleichungen vor. Aus diesem können die interessierenden Systemgrößen genau wie dort bestimmt werden. Am kritischen Punkt zwischen Gasphase und ferromagnetischer Phase gelten sowohl (7.16) als auch (7.17). Einsetzen dieser Gleichungen in (7.12) und (7.14) ergibt folgende Bestimmungsgleichungen für T_C^F :

$$\frac{1}{N} \left(\frac{k_B^2}{\hbar^2 \omega^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sum_{\sigma=-F}^F \zeta_3 \left(e^{\frac{\alpha(\sigma-F)}{k_B T_C^F}} \right) = T_C^{F-3} \quad (7.19)$$

$$\frac{1}{N} \left(\frac{k_B^2}{\hbar^2 \omega^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sum_{\sigma=-F}^F \sigma \zeta_3 \left(e^{\frac{\alpha(\sigma-F)}{k_B T_C^F}} \right) = T_C^{F-3} M^* \quad (7.20)$$

Ebenso gelten am kritischen Punkt zwischen ferromagnetischer und antiferromagnetischer Phase die Gleichungen (7.17) und (7.18). Durch Einsetzen derselben reduziert sich (7.14) wie im homogenen Fall zu $C_{0F} = \frac{M^*}{F}$. Damit ergibt (7.12) folgende Bestimmungsgleichungen für T_C^A :

$$T_C^A = \frac{\sqrt{\hbar^2 \omega^2}}{k_B} \left(\frac{N \left(1 - \frac{M^*}{F} \right)}{\zeta(3)(2F+1)} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (7.21)$$

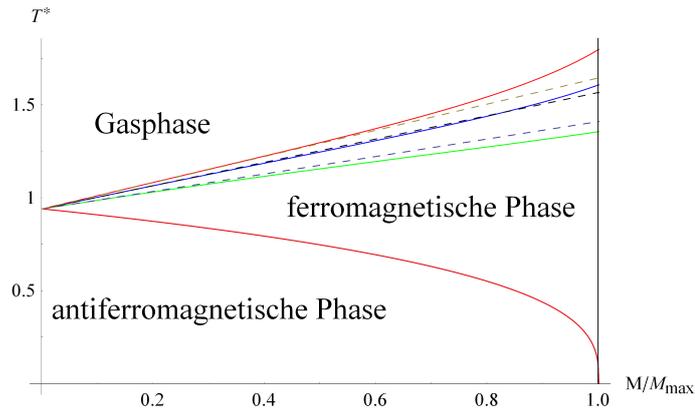


Abbildung 7.1: Phasendiagramm von Spinor-Bosonen in einer harmonischen Falle: Reduzierte kritische Temperatur als Funktion der relativen Magnetisierung. Die oberen Linien markieren den Übergang zur ferromagnetischen Phase, für Bosonen mit Spin 1 (grün), Spin 2 (blau) und Spin 3 (rot). Die untere Linie zeigt den spinunabhängigen Übergang zur antiferromagnetischen Phase (die Kurven liegen übereinander). Die gebrochenen Linien zeigen die kritischen Temperaturen des Übergangs zur ferromagnetischen Phase in linearer Ordnung in der Magnetisierung.

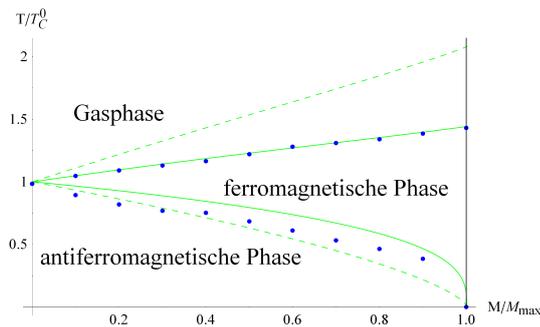


Abbildung 7.2: Vergleich des Phasendiagramms von homogenen Spin-1-Bosonen (gebogene Kurven) und Spin-1-Bosonen in einer harmonischen Falle. Die obere Linie kennzeichnet jeweils den Übergang zur ferromagnetischen Phase und die untere Linie den Übergang zur antiferromagnetischen Phase. Die Punkte zeigen die für ^{23}Na in [47] mithilfe einer Hartree-Fock-Popov-Näherung berechneten Ergebnisse (Die dortige Referenztemperatur ist $T_C = (2F + 1)^{\frac{1}{3}} T_C^0$).

Diskussion des Phasendiagramms

Abb. 7.1 zeigt das Phasendiagramm idealer Spinor-Bosonen in einem (dreidimensionalen, anisotropen) harmonischen Fallenpotential. Dabei ist die kritische Temperatur als Funktion der Magnetisierung aufgetragen. Abb. 7.2 zeigt, speziell für Spin 1-Bosonen, den Vergleich zum homogenen System. Der Fall $F = 1$ reproduziert das in den Ref. [47, 49] begründete Phasendiagramm.

Beim Übergang zum neutralen System gehen mit $M^* \rightarrow 0$ und $\alpha \rightarrow 0$, wie im homogenen Fall, die beiden kritischen Temperaturen ineinander über. Es gibt dann wieder nur einen Phasenübergang bei

$$T_C^0 := \frac{\sqrt{\hbar^2 \omega^2}}{k_B} \left(\frac{N}{\zeta(3)(2F+1)} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (7.22)$$

Wie im homogenen Fall steigt die Kondensationstemperatur des $\sigma = F$ -Zustandes für kleine Magnetisierungen linear mit derselben an. Die Kondensationstemperatur ist dabei höher und die Abhängigkeit von der Magnetisierung schwächer als dort. Die Entwicklung von (7.19) und (7.20) bis zur niedrigsten nicht-trivialen Ordnung in α erfordert einer anderen Robinson-Formel [63], da (3.49) nur für $\nu \notin \mathbb{N}$ gilt:

$$\zeta_\nu(e^x) = \frac{x^{\nu-1}}{(\nu-1)!} [H_{\nu-1} - \ln(-x)] + \sum_{n=0; n \neq \nu-1}^{\infty} \frac{\zeta(\nu-n)}{n!} x^n \quad \nu \in \mathbb{N}; \quad x < 0 \quad (7.23)$$

Darin bezeichnet $H_n = \sum_{i=1}^n \frac{1}{i}$ die n -te harmonische Zahl.

Daraus folgt

$$\zeta_3 \left(e^{\frac{\alpha(\sigma-F)}{k_B T_C^F}} \right) = \zeta(3) + \zeta(2) \left(\frac{\alpha(\sigma-F)}{k_B T_C^F} \right) + \mathcal{O}(\alpha^2) \quad (7.24)$$

und nach Einsetzen in (7.19) und (7.20) für kleine Werte α :

$$\left[(2F+1)\zeta(3) + \zeta(2) \frac{\alpha}{k_B T_C^F} \sum_{\sigma=-F}^F (\sigma-F) \right] c T_C^F \approx 1 \quad (7.25)$$

$$\left[\frac{1}{M^*} \sum_{\sigma=-F}^F \sigma(\sigma-F) \right] c T_C^F \approx \zeta(2) \frac{\alpha}{k_B T_C^F} x 1 \quad (7.26)$$

Auflösen der zweiten Gleichung nach $\zeta(2) \frac{\alpha}{k_B T_C^F} c T_C^F$, Einsetzen in die erste Gleichung liefert mit

$$\frac{\sum_{\sigma=-F}^F (\sigma-F)}{\sum_{\sigma=-F}^F \sigma(\sigma-F)} = \frac{-3}{F+1} \quad (7.27)$$

und (7.22):

$$T_C^F = \left(\frac{1 + \frac{3M^*}{F+1}}{(2F+1)c\zeta(3)} \right)^{\frac{1}{3}} + \mathcal{O}(\alpha^2) = T_C^0 \left(1 + \frac{M^*}{F+1} \right) + \mathcal{O}(\alpha^2) + \mathcal{O}(M^{*2}) \quad (7.28)$$

Dies zeigt, dass die lineare Steigung wegen $M^* \in [0, F]$ durch $\frac{F}{F+1}$ gegeben ist. Der Vergleich mit (3.52) reflektiert in analytischer Form, dass die Abhängigkeit von der Magnetisierung schwächer als im homogenen System ist. Die relative Abhängigkeit der kritischen Temperatur von der Magnetisierung reduziert sich im linearen Bereich für Spin $F = 1, 2, 3$ auf 44%, 38%, 36% und konvergiert für $F \rightarrow \infty$ gegen genau 30%, was zeigt, dass das Phasendiagramm homogener Spinor-Bosonen stärker vom Teilchenspin abhängig ist. Ein Vergleich der Absolutwerte der kritischen Temperatur ist dagegen nicht sinnvoll, da einerseits die Fallenfrequenz im homogenen Fall nicht gegeben ist und andererseits die Teilchendichte im inhomogenen Fall keine globale Größe ist.

Für die Kondensationstemperatur der $\sigma \neq F$ -Zustände ergab sich das analytische Resultat (7.21). Die relative Abhängigkeit der zweiten kritischen Temperatur T_C^A von der Magnetisierung ist durch eine $\left(1 - \frac{M^*}{F}\right)^{\frac{1}{3}}$ -Funktion gegeben, statt durch eine $\left(1 - \frac{M^*}{F}\right)^{\frac{2}{3}}$ -Funktion und deshalb für nicht zu stark polarisierte Systeme ($\frac{M^*}{F} < \frac{7}{8}$) ebenfalls schwächer als im homogenen Fall.

Das Fallenpotential rückt also die beiden kritischen Temperaturen nicht zu stark polarisierter Spinor-Bosonen näher an die kritische Temperatur spinentarteter, homogener Bosonen. Dies hat folgende Ursache: Zum Energiespektrum $\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{x}) = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \alpha F + U(\mathbf{x})$ tragen Zeeman-Term und Fallenpotential mit unterschiedlichen Vorzeichen bei. Die Verteilungsfunktion des $\sigma = F$ -Zustands liegt deshalb mit Falle näher an der des neutralen Systems als die des homogenen Systems.

Der Vergleich mit dem wechselwirkenden Fall für Bosonen mit Spin 1 in 7.2 zeigt, dass sich für die obere kritische Temperatur nur geringe Korrekturen aufgrund von Wechselwirkungen ergeben. Die Übergangstemperatur zur antiferromagnetischen Phase wird dagegen vom idealen System nur noch qualitativ richtig beschrieben. Dies entspricht der physikalischen Erwartung, dass, bevor Kondensation eintritt, die schwachen interatomaren Wechselwirkungen einen sehr geringen Einfluss haben, sobald jedoch ein Kondensat vorliegt, die Dichte im Kondensatpeak stark ansteigt und Wechselwirkungen wesentlich werden.

7.1.4 Kondensatdichte

Auch die Berechnung der globalen Kondensatdichten erfolgt in Analogie zu Abschnitt 3.3.2. Einsetzen von (7.17) in (7.12) und (7.14) ergibt die Kondensatdichte in der

ferromagnetischen Phase. Auch hier gilt wegen $T > T_C^A$ $C'_0 = 0$:

$$\frac{1}{N} \left(\frac{k_B^2}{\hbar^2 \omega^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sum_{\sigma=-F}^F \zeta_3 \left(e^{\frac{\alpha(\sigma-F)}{k_B T}} \right) = (1 - C_{0F}) T^{-3} \quad (7.29)$$

$$\frac{1}{N} \left(\frac{k_B^2}{\hbar^2 \omega^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sum_{\sigma=-F}^F \sigma \zeta_3 \left(e^{\frac{\alpha(\sigma-F)}{k_B T}} \right) = (M^* - F C_{0F}) T^{-3} \quad (7.30)$$

Ebenso ergibt Einsetzen von (7.17) in (7.11) und (7.14) die Kondensatdichte in der antiferromagnetischen Phase:

$$C'_0 = \frac{1 - \frac{M^*}{F}}{2F + 1} - \frac{1}{N} \left(\frac{k_B^2 T^2}{\hbar^2 \omega^2} \right)^{\frac{3}{2}} \zeta(3) \quad (7.31)$$

$$C_{0F} = \frac{1 + 2M^*}{2F + 1} - \frac{1}{N} \left(\frac{k_B^2 T^2}{\hbar^2 \omega^2} \right)^{\frac{3}{2}} \zeta(3) \quad (7.32)$$

Die thermische Besetzung in Gasphase, ferromagnetischer und antiferromagnetischer Phase folgt aus (7.12) und (7.14) und (7.16)–(7.18):

$$\begin{aligned} C_\sigma &= \frac{\eta}{N} \left(\frac{k_B^2 T^2}{\hbar^2 \omega^2} \right)^{\frac{3}{2}} \zeta_3 \left(\eta e^{\frac{\mu + \alpha\sigma - E_0}{k_B T}} \right) \\ C_\sigma &= \frac{1}{N} \left(\frac{k_B^2 T^2}{\hbar^2 \omega^2} \right)^{\frac{3}{2}} \zeta_3 \left(e^{\frac{\alpha(\sigma-F)}{k_B T}} \right) \\ C_\sigma &= \frac{1}{N} \left(\frac{k_B^2 T^2}{\hbar^2 \omega^2} \right)^{\frac{3}{2}} \zeta(3) \end{aligned} \quad (7.33)$$

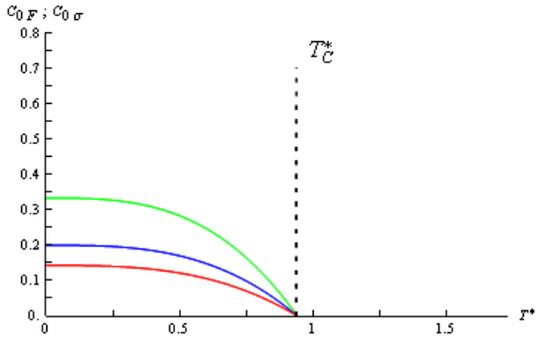


Abbildung 7.3: Kondensatdichte pro Spinzustand als Funktion der Temperatur, für Bosonen in einem harmonischen Potential mit Spin 1, (grün) Spin 2 (blau) und Spin 3 (rot) bei verschwindender Magnetisierung $\frac{M}{M_{\max}} = 0$. Die gebrochene Linie kennzeichnet den Phasenübergang zur BEK-Phase. Die $|\mathbf{k} = \mathbf{0}\sigma\rangle$ -Zustände sind entartet und identisch besetzt.

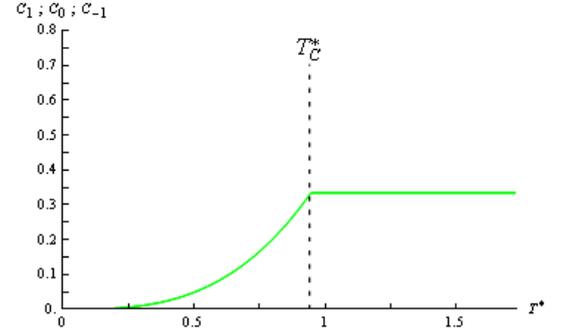


Abbildung 7.4: Temperaturabhängige thermische Besetzung für Spin 1-Bosonen in einem harmonischen Potential bei verschwindender Magnetisierung $\frac{M}{M_{\max}} = 0$. Die gebrochene Linie kennzeichnet den Phasenübergang zur BEK-Phase. Die Zustände $\sigma = 1, 2, 3$ sind spinentartet und identisch besetzt.

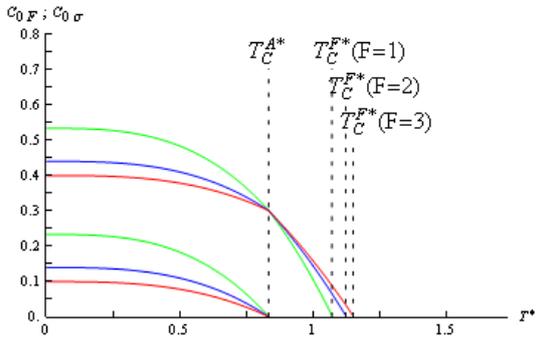


Abbildung 7.5: Kondensatdichte als Funktion der Temperatur, für Bosonen in einem harmonischen Potential mit Spin 1 (grün), Spin 2 (blau) und Spin 3 (rot) bei fester Magnetisierung $\frac{M}{M_{\max}} = 0.3$. Die obere Kurve zeigt jeweils die Besetzung des $|\mathbf{k}\sigma\rangle = |\mathbf{0}\sigma = F\rangle$ -Zustands, die untere Kurve jeweils die identische Besetzung aller $|\mathbf{0}\sigma \neq F\rangle$ -Zustände. Gebrochene Linien markieren die Phasenübergänge zur ferromagnetischen Phase (T_C^{F*}) und zur antiferromagnetischen Phase (T_C^{A*}).

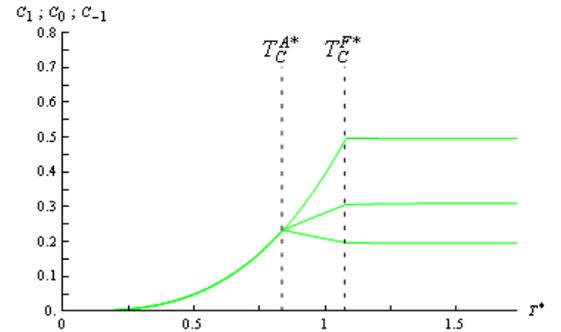


Abbildung 7.6: Temperaturabhängige thermische Besetzung der Zeeman-Niveaus für Bosonen in einem harmonischen Potential mit Spin 1 bei fester Magnetisierung $\frac{M}{M_{\max}} = 0.3$. Die obere Kurve zeigt die Gesamtbesetzung der $|\mathbf{k} \neq \mathbf{0}, 1\rangle$ -Zustände, die mittlere die der $|\mathbf{k} \neq \mathbf{0}, 0\rangle$ -Zustände und die untere die der $|\mathbf{k} \neq \mathbf{0}, -1\rangle$ -Zustände. Gebrochene Linien markieren die Phasenübergänge zur ferromagnetischen Phase (T_C^{F*}) und zur antiferromagnetischen Phase (T_C^{A*}).

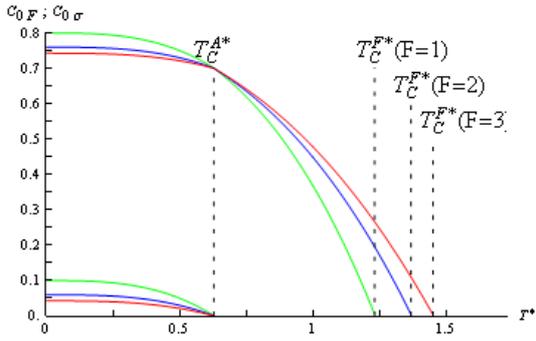


Abbildung 7.7: Wie Abbildung 7.5, bei $\frac{M}{M_{\max}} = 0.7$.

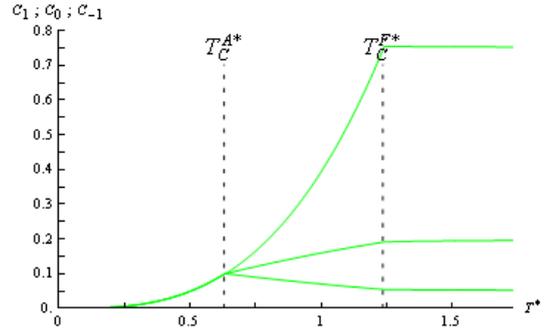


Abbildung 7.8: Wie Abbildung 7.6, bei $\frac{M}{M_{\max}} = 0.7$.

Diskussion der Kondensatdichte

Die Abbildungen zeigen die Kondensatbesetzung und die thermische Besetzung der Zeeman-Zustände durch ideale Spinor-Bosonen in einem harmonischen Fallenpotential als Funktion der Temperatur. Für $F = 1$ reproduzieren diese Ergebnisse die entsprechenden Resultate aus [49].

Offensichtlich steigt die Kondensatdichte schneller an als im freien System. Für verschwindende Magnetisierung, wenn es nur einen Phasenübergang gibt, kondensieren alle Spinzustände simultan. Einsetzen von (7.22) in (7.32) zeigt, dass der Temperaturverlauf jedes Spinzustandes durch den folgenden bekannten Ausdruck gegeben ist:

$$c_{0\sigma} = \frac{1}{2F+1} \left[1 - \left(\frac{T}{T_C^0} \right)^3 \right] \quad (7.34)$$

Ebenso zeigt das Einsetzen von (7.21) in (7.33), dass der Temperaturverlauf der thermischen Besetzung in den bekannten $\frac{1}{2F+1} \left(\frac{T}{T_C^0} \right)^3$ -Ausdruck übergeht.

In der antiferromagnetischen Phase, in der der Kondensatanteil die gesamte Magnetisierung trägt, zeigt die Kondensatdichte (7.32) aller Spinzustände dasselbe Temperaturverhalten. Die konstanten Verschiebungsterme sind dabei durch dieselben, in der Magnetisierung linearen Ausdrücke wie im homogenen Fall gegeben. Oberhalb von T_C^A , in der ferromagnetischen Phase, kondensiert nur der $\sigma = F$ -Zustand. Aus denselben Gründen wie den in Abschnitt 3.3.1 ausgeführten, kondensiert er dort schneller als in der antiferromagnetischen Phase. Der Knick in den Abbildungen repräsentiert die qualitative Änderung der Kondensationsgeschwindigkeit. In der antiferromagnetischen Phase nimmt die Kondensatdichte mit der dritten Potenz der thermischen Energie ab. In der ferromagnetischen Phase ist die Temperaturabhängigkeit noch stärker. Sie wird durch die temperaturabhängige Exponentialfunktion im Argument des Polylogarithmus unterstützt.

7.1.5 Chemisches und magnetochemisches Potential

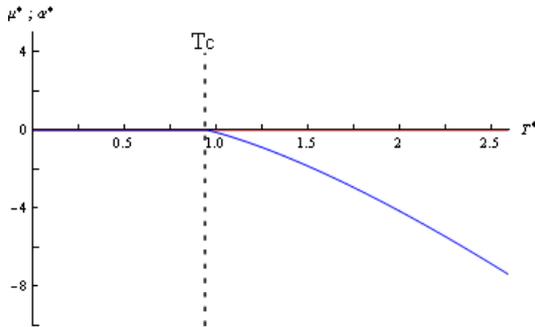


Abbildung 7.9: Temperaturabhängiges chemisches (blau) und magnetochemisches (rot) Potential für Spin 1-Bosonen in einem harmonischen Potential, bei fester Magnetisierung $\frac{M}{M_{\max}} = 0$. Die gebrochene Linie kennzeichnet den Phasenübergang.

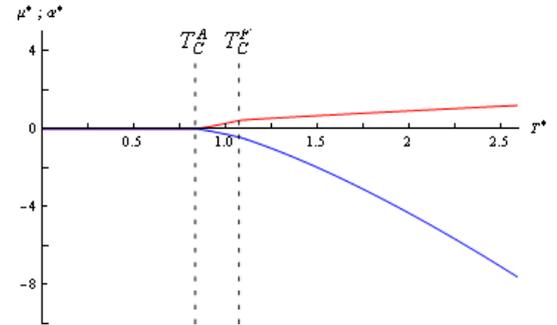


Abbildung 7.10: Temperaturabhängiges chemisches und magnetochemisches Potential für Spin 1-Bosonen in einem harmonischen Potential, bei fester Magnetisierung $\frac{M}{M_{\max}} = 0.3$. Gebrochene Linien markieren die Phasenübergänge zur ferromagnetischen Phase (T_C^F) und zur antiferromagnetischen Phase (T_C^A).

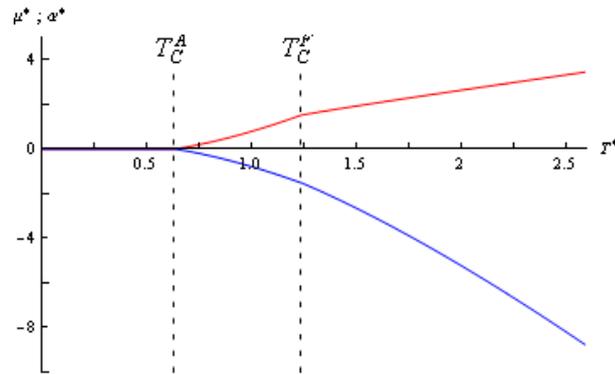


Abbildung 7.11: Wie Abbildung 7.10 bei $\frac{M}{M_{\max}} = 0.7$.

Diskussion des magnetochemischen Potentials

Es ist deutlich ersichtlich, dass das Gesamtmagnetfeld in der ferromagnetischen Phase schneller mit der Temperatur abfällt als in der Gasphase. Dies hat seine Ursache wieder darin, dass die Magnetisierung kondensiert und der Gasanteil (der allein das messbare Magnetfeld bewirkt) hierdurch entpolarisiert.

Der Übergang ist schärfer als im homogenen Fall. Dies beruht auf dem schnelleren Anstieg der Kondensatdichte gemäß $1 - \left(\frac{T}{T_C^0}\right)^3$, anstatt wie $1 - \left(\frac{T}{T_C^0}\right)^{\frac{3}{2}}$ im homogenen Fall. Dadurch nimmt die Anzahl der magnetischen Momente im Gasanteil schneller ab.

Die lineare innere magnetische Suszeptibilität folgt mithilfe von (7.23) analog zu Abschnitt 3.3.3 durch Entwicklung von (7.11) und (7.14):

$$\alpha = \theta(T - T_C^0) \frac{3Tk_B M^*}{F(F+1)} \frac{\zeta_3\left(e^{\frac{E_0+\mu}{k_B T}}\right)}{\zeta_2\left(e^{\frac{E_0+\mu}{k_B T}}\right)} \xrightarrow{T \rightarrow \infty} \frac{3k_B T M^*}{F(F+1)} \quad (7.35)$$

Da $\frac{\zeta_3(e^{-x})}{\zeta_2(e^{-x})}$ schneller als $\frac{\zeta_{\frac{3}{2}}(e^{-x})}{\zeta_{\frac{1}{2}}(e^{-x})}$ konvergiert ($\mu < 0$ und $|\mu| \gg T$ für $T \gg 1$) und E_0 in diesem Temperaturbereich keine Relevanz mehr hat, gilt das Curie-Verhalten bei gleicher Temperatur sogar in besserer Näherung als im homogenen Fall. Im Grenzfall $T \rightarrow \infty$ geht das Ergebnis, wie im homogenen Fall, in das des Maxwell-Boltzmann-Gases (D.11) über. Die magnetische Suszeptibilität ist dann unabhängig davon, ob ein äußeres Potential vorliegt oder nicht, weil der Energiebeitrag desselben dann keine Relevanz mehr im Vergleich zur thermischen Energie hat.

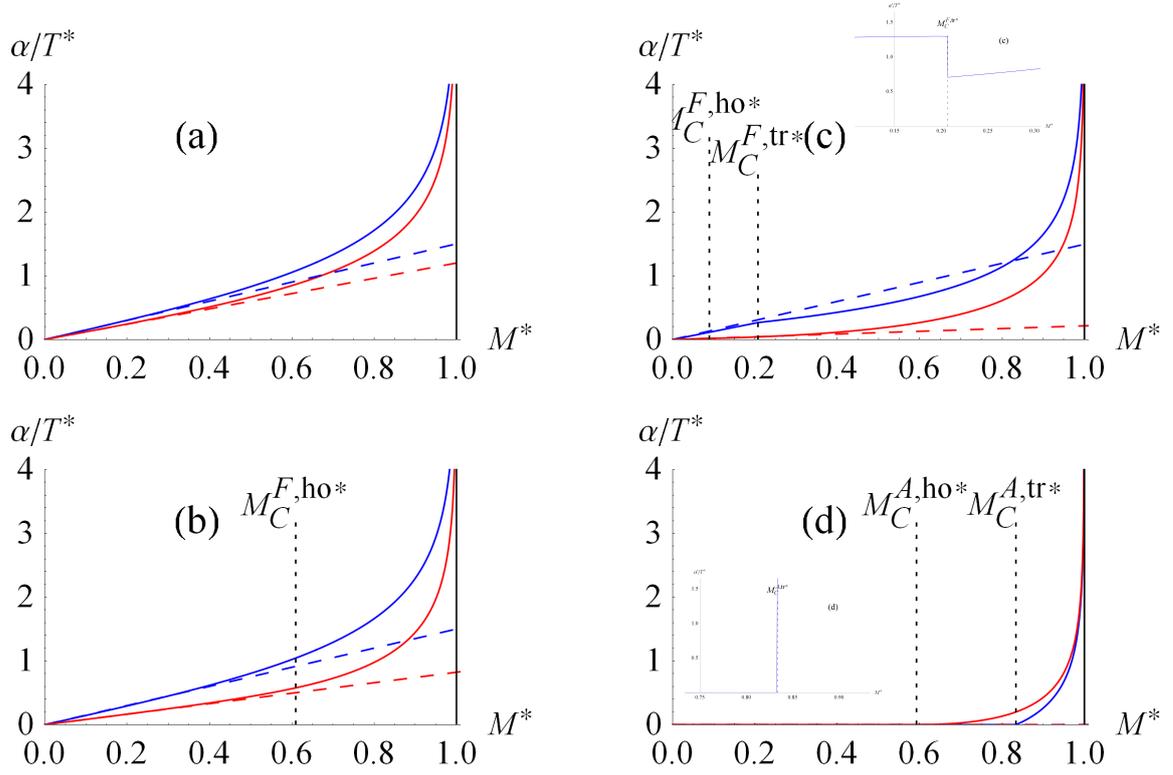


Abbildung 7.12: Innere magnetische Suszeptibilität: Reduziertes Gesamtmagnetfeld $\frac{B^*}{T^*} := \frac{\alpha}{T^*} = \frac{\mu_{BF} B}{T^* \varepsilon_u}$ als Funktion der relativen Magnetisierung $\frac{M}{M_{\max}}$ für homogene Bosonen mit Spin 1 (rot) und inhomogene Bosonen mit Spin 1 im harmonischen Potential (blau), bei fester Temperatur $T^* := \frac{T}{T_C} = 2.8$ (a), 1.65 (b), 1.1 (c), 0.55 (d). Die gebrochenen Linien M_C^{A,ho^*} und M_C^{A,tr^*} markieren im homogenen bzw. inhomogenen Fall den Phasenübergang von antiferromagnetischer Phase (ggf. links) zu ferromagnetischer Phase (rechts), M_C^{F,ho^*} und M_C^{A,tr^*} den Phasenübergang von Gasphase (ggf. links) und ferromagnetischer Phase (rechts). Die gebrochenen Linien zeigen jeweils den analytischen Ausdruck der linearen Näherung. Die Einfügung zeigt die erste Ableitung von $\frac{B^*}{T^*}$ bezüglich M^* im Falle inhomogener Bosonen.

Abb. 7.12 zeigt einen Vergleich der inneren magnetischen Suszeptibilität von Spinor-Bosonen im harmonischen Potential und freien Spinor-Bosonen.

Es fällt auf, dass das induzierte Magnetfeld bei entsprechender Temperatur $T > T_C^0$ größer als für freie Systeme ist, dagegen für $T < T_C^0$ kleiner ist. Diese Situation kann anhand des Phasendiagramms 7.2 geklärt werden: Im homogenen System setzt die Kondensation für $T > T_C^0$ schon bei kleinerer Magnetisierung ein, weshalb weniger zum Feld beitragende magnetischen Momente vorliegen. Ebenso findet der Übergang von der antiferromagnetischen Phase, in der überhaupt keine felderzeugenden magnetische Momente vorliegen, zur ferromagnetischen Phase für Temperaturen $T < T_C^0$ erst bei höherer Magnetisierung statt als im homogenen System. Die Einfügungen in Abb. 7.12 zeigen, dass, anders als für homogene Bosonen, schon die erste Ableitung des Magnetfeldes nach der Magnetisierung eine

Unstetigkeit an beiden Phasengrenzen aufweist. Nach der Ehrenfest'schen Klassifikation der Phasenübergänge liegt deshalb für ideale Spinor-Bosonen im harmonischen Potential ein Phasenübergang 2.Ordnung vor, während ohne Potential ein Phasenübergang 3. Ordnung festgestellt wurde.

7.2 Dynamische Eigenschaften

Korrelationsfunktionen schwach inhomogener Systeme und solcher von geringer Dichte können in ähnlicher Weise durch eine semiklassische Local-Density-Approximation (LDA) beschrieben werden wie die bisherigen Größen. Für Größen, die proportional zur Teilchenzahl sind, genügt es jedoch nicht einfach über die lokalen Größen zu summieren. Vielmehr ist die Teilchenzahl ebenfalls auf die Zellen aufgeteilt zu denken und die lokalen Größen sind mit der lokalen Teilchendichte zu gewichten. Die Teilchendichte-Spektralfunktion kann gemäß [2] in LDA-Näherung wie folgt geschrieben werden:

$$G''^{\text{LDA}}(\mathbf{q}, E) := \int d^3x C(\mathbf{x}) G''(\mathbf{q}, E, \mathbf{x}) \quad (7.36)$$

Darin ist $G''(\mathbf{q}, E, \mathbf{x})$ die Spektralfunktion der durch den semiklassischen Hamiltonoperator $\hat{H}(\mathbf{x}) = \hat{H} + U(\mathbf{x})$ beschriebenen (homogenen) Zelle mit Schwerpunktkoordinate \mathbf{x} , und $C(\mathbf{x}) = \frac{n(\mathbf{x})}{N} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} n_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{x})$ die Teilchenkonzentration dieser Zelle. Das System wird also wieder als *lokal* homogen und isotrop aufgefasst. Zur Beschreibung von Anregungen mit kleinen korrespondierenden Anregungsimpulsen (wie sie in Bragg-spektroskopischen Experimenten vorliegen) gilt die LDA als gute Näherung [2]. Sie ist deshalb zur Beschreibung der kollektiven Anregungsspektren geeignet. Für große Störungen ist die Annahme lokaler Homogenität dagegen nicht mehr sinnvoll und es muss auf andere Näherungen zurückgegriffen werden.

7.2.1 Dichte-Spektralfunktionen in LDA-Näherung

Im Folgenden werden zuerst die lokale Teilchendichte und die lokalen Korrelationsgrößen berechnet und anschließend zur Ermittlung der globalen Korrelationsgrößen (7.36) im Rahmen einer LDA-Näherung verwendet.

Lokale Dichte

Da die Kondensatome alle im selben Einteilchenzustand sind, dem wohlbekannten Grundzustand im dreidimensionalen harmonischen Potential, folgt die räumliche Konzentrationsverteilung einer Spinkomponente des Kondensatanteils unmittelbar aus der

globalen Kondensatdichte:

$$\overline{C_{0\sigma}}(\mathbf{x}) = C_{0\sigma} |\phi_{0\sigma}(\mathbf{x})|^2 \quad \text{mit} \quad \phi_{0\sigma}(\mathbf{x}) = \prod_{i=1}^3 \left(\frac{m\omega_i}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega_i x_i^2}{2\hbar}} \quad (7.37)$$

Die normierte thermische Konzentrationsverteilung einer Spinkomponente lautet mit (7.8) und (7.10):

$$\overline{C_{\sigma}^{\text{ther}}}(\mathbf{x}) = \frac{C_{\sigma}^{\text{ther}}(\mathbf{x})}{C_{\sigma}^{\text{ther}}} = \left(\frac{\beta m \overline{\omega^2}}{2\pi} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{\zeta_{\frac{3}{2}}(\eta\lambda'_{\sigma}(\mathbf{x}))}{\zeta_3(\eta\lambda'_{\sigma})} \quad (7.38)$$

Die lokale Konzentration eines Spinzustands resultiert zusammen mit (7.33):

$$\begin{aligned} C_{\sigma}(\mathbf{x}) &= C_{0\sigma} \overline{C_{0\sigma}}(\mathbf{x}) + C_{\mathbf{k} \neq 0\sigma} \overline{C_{\mathbf{k} \neq 0\sigma}}(\mathbf{x}) \\ &= C_{0\sigma} \left(\frac{m\sqrt{\overline{\omega^2}}}{\pi\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{m}{\hbar}(\omega_1 x_1^2 + \omega_2 x_2^2 + \omega_3 x_3^2)} + \frac{1}{\eta N} \left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \zeta_{\frac{3}{2}}(\eta\lambda'_{\sigma}(\mathbf{x})) \end{aligned} \quad (7.39)$$

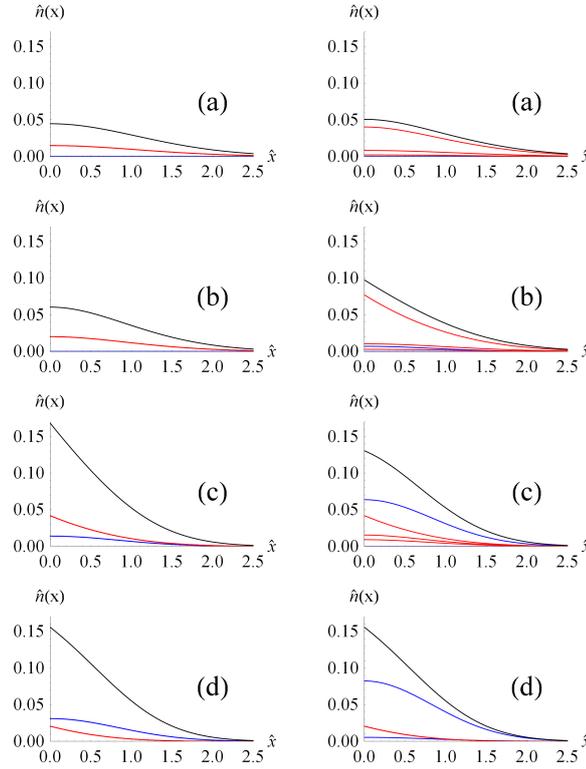


Abbildung 7.13: Querschnitt durch die räumliche Dichteverteilung von neutralen Bosonen (links) und Spinor-Bosonen mit $M^* = 0.7$ (rechts) als Funktion des reduzierten Abstands $\hat{x} = x^* \frac{\omega^2}{\omega_i^2}$ vom Fallenzentrum in Richtung einer beliebigen Koordinatenachse x_i bei fester Temperatur $T^* = 1.4$ (a) $T^* = 1.2$ (b) $T^* = 0.8$ (c) und $T^* = 0.5$ (d). Dargestellt ist die lokale BEK-Dichte des $\sigma = 1$ Zustandes (blau, oben) und der $\sigma \neq 1$ -Zustände (blau, unten) und die lokale thermische Dichte des $\sigma = 1$ Zustandes (rot, oben), des $\sigma = 0$ Zustandes (rot, Mitte) und des $\sigma = -1$ Zustandes (rot, unten) sowie die gesamte lokale Dichte (schwarz). Für neutrale Bosonen liegen die Kurven übereinander.

LDA-Dichte-Spektralfunktion

Da das Systemvolumen im Fallenpotential anders als im homogenen System keine sinnvolle Größe mehr ist, muss die Teilchendichte-Spektralfunktion als extensive Größe definiert werden. Im Unterschied zu (2.28) tritt deshalb der Faktor $\frac{1}{V}$ nicht in der Definition auf:

$$G''_{\rho, \rho^+}(\mathbf{q}, t - t') = \frac{1}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\sigma} A(\sigma) G''_{\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma} \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}}(t - t') \quad (7.40)$$

Mit (2.38), (7.5) und (7.4) lautet die enthaltene elementare Zweiteilchenspektralfunktion in Impuls-Spin-Darstellung:

$$G''_{a_{\mathbf{k}\sigma}^+ a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^+ a_{\mathbf{k}\sigma}}(E, \mathbf{x}) = \hbar \left(n_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{x}) - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}(\mathbf{x}) \right) \delta \left(E - (\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}}) \right) \quad (7.41)$$

Offensichtlich heben sich die Ortsabhängigkeiten in der Delta-Funktion ebenso wie die Spinabhängigkeiten auf. Dies bedeutet, dass die Dichte-Spektralfunktionen, in jeder Zelle einzeln, ebenso formal invariant gegenüber der Existenz eines harmonischen Potentials sind wie sie es gegenüber der Existenz eines Magnetfeldes sind. Die Ortsabhängigkeit betrifft allein die enthaltenen Verteilungsfunktionen. Da die \mathbf{k} -Summation in Abschnitt 4.2.1 die Ortskoordinate nicht betrifft, kann die Gleichung (4.5) in jeder Zelle verwendet werden. Zusammen mit (2.28) folgt aus (7.40) für die lokale Teilchendichte-Spektralfunktion:

$$G''_{\rho,\rho^+}(E, \mathbf{q}, \mathbf{x}) = N \sum_{\mathbf{k}\sigma} A(\sigma) C_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{x}) \left[\delta(E - (\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} - \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma})) - \delta(E + (\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} - \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma})) \right] \quad (7.42)$$

Aus demselben Grund gilt auch eine zu (4.19) analoge Gleichung. Da die Zellen nach Voraussetzung makroskopisch im thermodynamischen Sinne sind, kann in jeder Zelle einzeln die Summe über die quasikontinuierlichen Impulsniveaus durch ein Integral ersetzt werden:

$$\sum_{\mathbf{k}}^{\text{Zelle}} \rightarrow V_{\text{Zelle}} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \quad (7.43)$$

Darin bezeichnet V^{Zelle} das Volumen einer Zelle. Mithilfe der Transformation $\lambda_\sigma \rightarrow \lambda'_\sigma(\mathbf{x})$ folgt, anstatt von (4.20) in einer Zelle mit Schwerpunktkoordinate \mathbf{x} , die folgende Gleichung:

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}\sigma} C_{\mathbf{k},\sigma}^{\text{Zelle}} \Big|_{\mathbf{x}} f(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} - \varepsilon_{\mathbf{k},\sigma}) &= \sum_{\sigma=-F}^F A(\sigma) C_{0\sigma}^{\text{Zelle}} \Big|_{\mathbf{x}} f(\varepsilon_{\mathbf{q}}) \\ - \frac{V^{\text{Zelle}}}{\eta N \sqrt{\pi} \lambda_T^3} \int_{-\infty}^{\infty} dz \ln \left(1 - \eta \lambda'_\sigma \Big|_{\mathbf{x}} e^{-z^2} \right) f\left(\varepsilon_{\mathbf{q}} - 2z \sqrt{\frac{\varepsilon_{\mathbf{q}}}{\beta}}\right) & \end{aligned} \quad (7.44)$$

Darin bezeichnet $C_{\mathbf{k}\sigma}^{\text{Zelle}} \Big|_{\mathbf{x}} = \frac{1}{V^{\text{Zelle}}} \int_{V^{\text{Zelle}}} d^3 x C_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{x})$ die Teilchendichte der Zelle mit Schwerpunktkoordinate \mathbf{x} . Entsprechend der zweiten Voraussetzung, der Kleinheit der Zellen, kann der Grenzübergang $V^{\text{Zelle}} \rightarrow d^3 x$ bzw. $C_{\mathbf{k},\sigma}^{\text{Zelle}} \Big|_{\mathbf{x}} \rightarrow C_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{x})$ ausgeführt werden. Gleichung (7.44) geht dadurch in den folgenden Ausdruck über:

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}\sigma} C_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{x}) f(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} - \varepsilon_{\mathbf{k},\sigma}) &= \sum_{\sigma=-F}^F A(\sigma) C_{0\sigma}(\mathbf{x}) f(\varepsilon_{\mathbf{q}}) \\ - \frac{d^3 x}{\eta N \sqrt{\pi} \lambda_T^3} \sum_{\sigma=-F}^F A(\sigma) \int_{-\infty}^{\infty} dz \ln \left(1 - \eta \lambda'_\sigma(\mathbf{x}) e^{-z^2} \right) f\left(\varepsilon_{\mathbf{q}} - 2z \sqrt{\frac{\varepsilon_{\mathbf{q}}}{\beta}}\right) & \end{aligned} \quad (7.45)$$

Nach Ausführen des Integrals über die Delta-Funktionen folgt aus (7.42) wie in Abschnitt 4.2.3 mit (7.45), (4.23), (4.21), (4.24) und (E.23) die Teilchendichte-Spektralfunktionen einer Zelle mit Schwerpunktskoordinate \mathbf{x} :

$$\begin{aligned}
 G''_{\rho,\rho^+}(\mathbf{q}, E, \mathbf{x}) &= 2NE\delta(E^2 - \varepsilon_{\mathbf{q}}^2) \sum_{\sigma=-F}^F A(\sigma)C_{0\sigma}(\mathbf{x}) + \frac{k_B T m^{\frac{3}{2}}}{\eta\sqrt{2\varepsilon_{\mathbf{q}}}\hbar^3(2\pi)^2} \\
 &\times \sum_{\sigma=-F}^F A(\sigma) \left[\zeta_1\left(\eta\lambda'_{\sigma}(\mathbf{x})e^{-\frac{(E-\varepsilon_{\mathbf{q}})^2}{4\varepsilon_{\mathbf{q}}k_B T}}\right) - \zeta_1\left(\eta\lambda'_{\sigma}(\mathbf{x})e^{-\frac{(E+\varepsilon_{\mathbf{q}})^2}{4\varepsilon_{\mathbf{q}}k_B T}}\right) \right] \quad (7.46)
 \end{aligned}$$

Im Grenzfall $\omega \rightarrow \mathbf{0}$ und $E_0 = 0$ gilt $\lambda'_{\sigma}(\mathbf{x}) \rightarrow \lambda_{\sigma}$ und es gilt die Teilchenzahldensität (3.25) des homogenen Systems. Nach Verwendung derselben geht (7.46) in folgenden Ausdruck über:

$$G''_{\rho,\rho^+}(\mathbf{q}, E, \mathbf{x}) \rightarrow \frac{1}{V} G''_{\rho,\rho^+}{}^{\text{hom}} \quad (7.47)$$

Im homogenen Fall gilt für die lokale Dichte $C(\mathbf{x}) = \frac{1}{V}$, so dass mit (7.36) das frühere Ergebnis (4.26) reproduziert ist.

Nach Einsetzen von (7.46) und (7.39) in (7.36) gilt:

$$\begin{aligned}
 G''_{\rho,\rho^+}{}^{\text{LDA}}(\mathbf{q}, E) &= 2NE\delta(E^2 - \varepsilon_{\mathbf{q}}^2) \sum_{\sigma=-F}^F A(\sigma)C_{0\sigma} \\
 &+ \frac{k_B T m^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{2\varepsilon_{\mathbf{q}}}\hbar^3(2\pi)^2} \int d^3x \left\{ \right. \\
 &\times \sum_{\sigma=-F}^F \left[C_{0\sigma} \left(\frac{m\sqrt{\omega^2}}{\pi\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{m}{\hbar}(\omega_1 x_1^2 + \omega_2 x_2^2 + \omega_3 x_3^2)} + \frac{1}{\eta N} \left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \zeta_{\frac{3}{2}}(\lambda'_{\sigma}(\mathbf{x})) \right] \\
 &\times \sum_{\sigma=-F}^F A(\sigma) \left[\zeta_1\left(\eta\lambda'_{\sigma}(\mathbf{x})e^{-\frac{(E-\varepsilon_{\mathbf{q}})^2}{4\varepsilon_{\mathbf{q}}k_B T}}\right) - \zeta_1\left(\eta\lambda'_{\sigma}(\mathbf{x})e^{-\frac{(E+\varepsilon_{\mathbf{q}})^2}{4\varepsilon_{\mathbf{q}}k_B T}}\right) \right] \left. \right\} \quad (7.48)
 \end{aligned}$$

Diskussion der Dichte-Spektralfunktionen

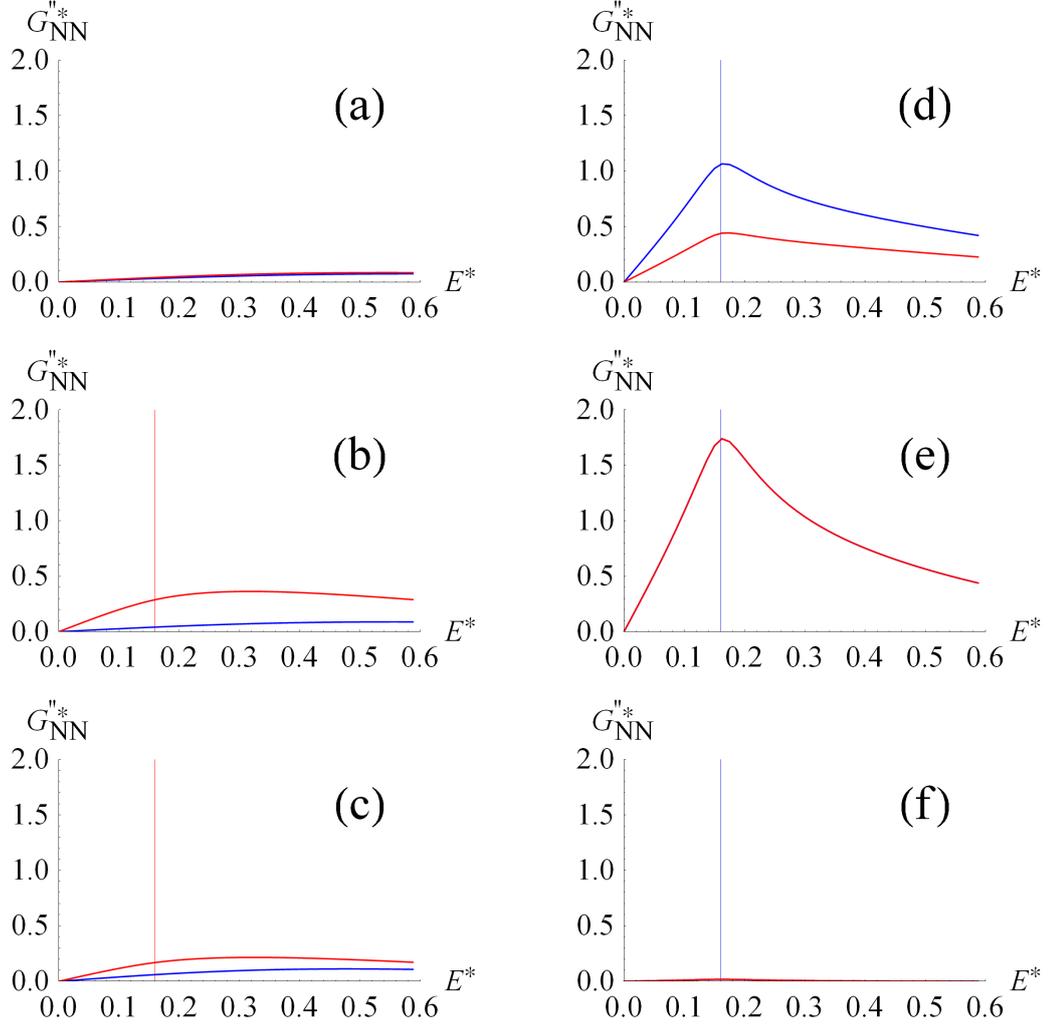


Abbildung 7.14: Energieabhängige Teilchenzahl-Spektralfunktion $G''_{NN+}^* := N\varepsilon_u G''_{NN+}^{\text{LDA}}$ für Spin-1-Bosonen in einer harmonischen Falle in LDA-Näherung, bei fester Magnetisierung $M^* = 0$ (blau) und $M^* = 0,7$ (rot), fester Anregungswellenzahl $q^* = 0,4$, Teilchenzahl $N = 10^6$ und Fallenfrequenz $\omega_1^* = \omega_2^* = 2\omega_3^* = 4N^{-1/3}$, sowie fester Temperatur $T^* = 1.30$ (a), 1.17 (b), 0.988 (c), 0.893 (d), 0.598 (e), 0.0940 (f).

T^*	0.0940	0.598	0.893	0.988	1.17	1.30
T/T_C^0	0.100	0.636	0.950	1.05	1.24	1.38
$T/T_C^A(M^* = 0.7)$	0.149	0.950	1.42	1.57	1.86	2.06
$T/T_C^F(M^* = 0.7)$	0.0761	0.484	0.723	0.800	0.950	1.05
$M^* = 0$	AF	AF	AF	G	G	G
$M^* = 0.7$	AF	AF	F	F	F	G
Phase: AF: antiferromagnetische; F: ferromagnetische; G: Gasphase						
$T_C^0 = 0.9405$ $T_C^A(M^* = 0.7) = 0.6296$ $T_C^F(M^* = 0.7) = 1.235$						

Die Abbildungen zeigen die Teilchendichte-Spektralfunktion in LDA-Näherung von neutralen und Spinor-Bosonen in einem harmonischen Potential, bei festem Anregungsimpuls und verschiedenen festen Temperaturen als Funktion der Anregungsenergie.

In Abschnitt 7.2.1 wurden bereits die formalen Invarianzen der lokalen Größen $G''_{N,N^+}(\mathbf{q}, E, \mathbf{x})$ bemerkt. Dies bedeutet, dass die Spektralfunktion jeder Zelle keinen qualitativen Unterschied zu der des homogenen Systems aufweist. Die Gesamtspektralfunktion $G''_{N,N^+}^{\text{LDA}}(\mathbf{q}, E)$ ist deshalb eine Überlagerung verschiedentlich gewichteter solcher Spektralfunktionen. Es ist deshalb klar, dass sich wie im homogenen Fall qualitative Veränderungen zwischen neutralen Bosonen und Spinor-Bosonen allein in einem mittleren Temperaturbereich, als Folge von Unterschieden in der Gleichgewichts-Thermodynamik, ergeben können. Ein Effekt der Überlagerung vieler nur quantitativ verschiedener Spektralfunktionen spiegelt sich in der Aufweichung der Spektralfunktion, wie insbesondere am thermischen Peak ersichtlich, wider. Bemerkenswert ist auch, dass die Fläche unter der Spektralfunktion im Kondensatregime größer als für höhere Temperaturen ist.

Dies liegt einerseits daran, dass der thermische Peak mit dem Rest des Spektrums verläuft, so dass es den Anschein hat, der Anteil, welcher im homogenen Fall durch einen scharfen Peak gegeben war, erhöhe das Spektrum im Allgemeinen. Zum anderen ist dies eine Konsequenz des schnelleren Abfalls der lokalen Kondensatdichte mit Abstand zum Fallenzentrum im Vergleich zur lokalen thermischen Dichte: Die lokale Spektralfunktion $G''(\mathbf{q}, E, \mathbf{x})$ hat in Zellen nahe dem Fallenzentrum einen größeren Wert. Deshalb ist der mit dem Kondensatanteil gewichtete Anteil der Spektralfunktionen gegenüber dem mit dem thermischen Anteil gewichteten Teil betont. Daraus resultiert eine Erhöhung der Spektralfunktion im Kondensatregime.

Wie im homogenen Fall fällt auf, dass Spinor-Bosonen nur im mittleren Temperaturbereich ein qualitativ anderes Absorptionsvermögen zeigen als neutrale Bosonen. Bei hoher Temperatur wird der Unterschied der Spektren gering, bei tiefer Temperatur verschwindet er gänzlich. Der Unterschied zur Teilchendichte-Spektralfunktion homogener Bosonen besteht vor allem in einer Verbreiterung des vom Kondensat bewirkten Peaks. Darüber bleibt bemerkenswert, dass die Spektralfunktion von Spinor-Bosonen bei hoher Temperatur, anders als im homogenen Fall, oberhalb derer neutraler Bosonen liegt. Dies liegt

daran, dass die Energiebeiträge von Fallenpotential und Zeeman-Effekt in der Verteilungsfunktion mit entgegengerichtetem Vorzeichen auftreten. Im mittleren Temperaturbereich liegt die Spektralfunktion von Spinor-Bosonen jedoch aufgrund der höheren Kondensatdichte unterhalb der Spektralfunktion spinentarteter Bosonen.

Natürlich ist die Gleichheit der Spektren wie im homogenen Fall auf die formale Invarianz der Spektralfunktion gegenüber der Existenz eines Magnetfeldes zurückzuführen. Die Unterschiede zwischen homogenen und magnetisierten Bosonen sind dann auf solche in den enthaltenen Verteilungsfunktionen reduziert. In der antiferromagnetischen Phase gilt $\alpha = 0$, so dass der Zeeman-Term verschwindet und damit auch die in der Spektralfunktion enthaltenen Verteilungsfunktionen identisch der des neutralen Systems ist. Für hinreichend tiefe Temperaturen sind die Spektralfunktionen von magnetisiertem und neutralem System auch bei Anwesenheit eines harmonischen Potentials identisch. Für hohe Temperaturen ist der Einfluss des Zeeman-Terms gering. Die thermische Energie dominiert dann über den temperaturunabhängigen Zeeman-Term. Die Verteilungsfunktionen von homogenen und magnetisierten Bosonen unterscheiden sich nur quantitativ. In der Gasphase gibt es keine Nebenbedingung, die eine bestimmte Abhängigkeit von chemischem Potential und Magnetfeld erzwingt. Im mittleren Temperaturbereich besteht jedoch ein wesentlicher Unterschied zwischen neutralem und magnetisiertem System: Wie im homogenen Fall bildet das magnetisierte System schon bei höherer Temperatur als das neutrale System einen Peak aus, weil die Kondensationstemperatur mit der Magnetisierung ansteigt. Das magnetisierte System ist dann in der ferromagnetischen Phase und das neutrale System noch in der Gasphase.

Die Spektralfunktion des magnetischen Moments des Systems ist mit der Teilchendichte-Spektralfunktion, wie im homogenen Fall, über den in jedem σ -Summanden auftretenden Faktor $A(\sigma)$ verknüpft. Daraus ergeben sich dieselben Konsequenzen wie in Abschnitt 4.2.4 diskutiert. Insbesondere erfährt der in Abschnitt 7.1.5 bemerkte Meißner-Effekt auch im inhomogenen Fall, vermittelt durch den Delta-Peak im Spektrum, seine Begründung durch die Kohärenz des BEKs.

7.2.2 Teilchenstrom-Spektralfunktionen in LDA-Näherung

Es folgt die Berechnung der Teilchenstrom-Spektralfunktion sowie der Spektralfunktion des magnetischen Gesamtmoments. Dies geschieht in Analogie zu Abschnitt 4.3, wobei sich keine Modifikationen als die in Abschnitt 7.2.1 vorgenommenen ergeben, so dass die Darstellung auf Angabe der zentralen Gleichungen beschränkt werden kann:

Die Gleichungen (7.41) und (2.20) liefern zusammen mit (4.5) die Spektralfunktion:

$$G''_{J\alpha J\alpha'}(E, \mathbf{q}, \mathbf{x}) = N \sum_{\mathbf{k}\sigma} A(\sigma) \left(k_\alpha + \frac{q_\alpha}{2}\right) \left(k'_\alpha + \frac{q'_\alpha}{2}\right) C_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{x}) \times \left[\delta\left(E - (\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} - \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma})\right) - \delta\left(E + (\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} - \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma})\right) \right] \quad (7.49)$$

Desweiteren kann die Stromkorrelationsfunktion in jeder Zelle in einen longitudinalen und einen transversalen Anteil zerlegt werden. Die Gleichungen (4.35) und (4.41) haben lokale Gültigkeit, da keine der in Abschnitt 4.3.1 berechneten Summen die Ortsabhängigkeit der Summanden betrifft. Mit der Transformation $\lambda_\sigma \rightarrow \lambda'_\sigma(\mathbf{x})$ folgt wie in Abschnitt 7.2.1 eine zu (4.47) analoge Gleichung:

$$\begin{aligned} & \sum_{\mathbf{k}\sigma} A(\sigma) k^2 (1 - \xi^2) C_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{x}) d^3x f\left(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} - \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}\right) \\ &= \frac{8\pi\beta d^3x}{N\eta q \lambda_T^6} \int_{-\infty}^{\infty} dz z \ln\left(1 - \eta \lambda'_\sigma(\mathbf{x}) e^{-z^2}\right) F\left(\varepsilon_{\mathbf{q}} + 2\sqrt{\frac{z\varepsilon_{\mathbf{q}}}{\beta}}\right) \end{aligned} \quad (7.50)$$

folgt zusammen mit (7.11) nach Ausführen des verbleibenden Integrals wie in Abschnitt (4.3.4) die longitudinale und die transversale Komponente der Teilchenstrom-Spektralfunktion:

$$G''_{J,J+}(\mathbf{q}, E, \mathbf{x}) = \frac{E^2}{\hbar^2 q^2} G''_{N,N+}(E, \mathbf{q}, \mathbf{x}) \quad (7.51)$$

$$\begin{aligned} G''_{J,J+}(\mathbf{q}, E, \mathbf{x}) &= \frac{d^3x \sqrt{m} (k_B T)^2}{\sqrt{2\varepsilon_{\mathbf{q}}} (2\pi)^2 \hbar^3} \\ &\times \sum_{\sigma=-F}^F A(\sigma) \left(\zeta_2\left(\eta \lambda'_\sigma(\mathbf{x}) e^{-\frac{(E-\varepsilon_{\mathbf{q}})^2}{4k_B T \varepsilon_{\mathbf{q}}}}\right) - \zeta_2\left(\eta \lambda'_\sigma(\mathbf{x}) e^{-\frac{(E+\varepsilon_{\mathbf{q}})^2}{4k_B T \varepsilon_{\mathbf{q}}}}\right) \right) \end{aligned} \quad (7.52)$$

Diskussion der Strom-Spektralfunktionen

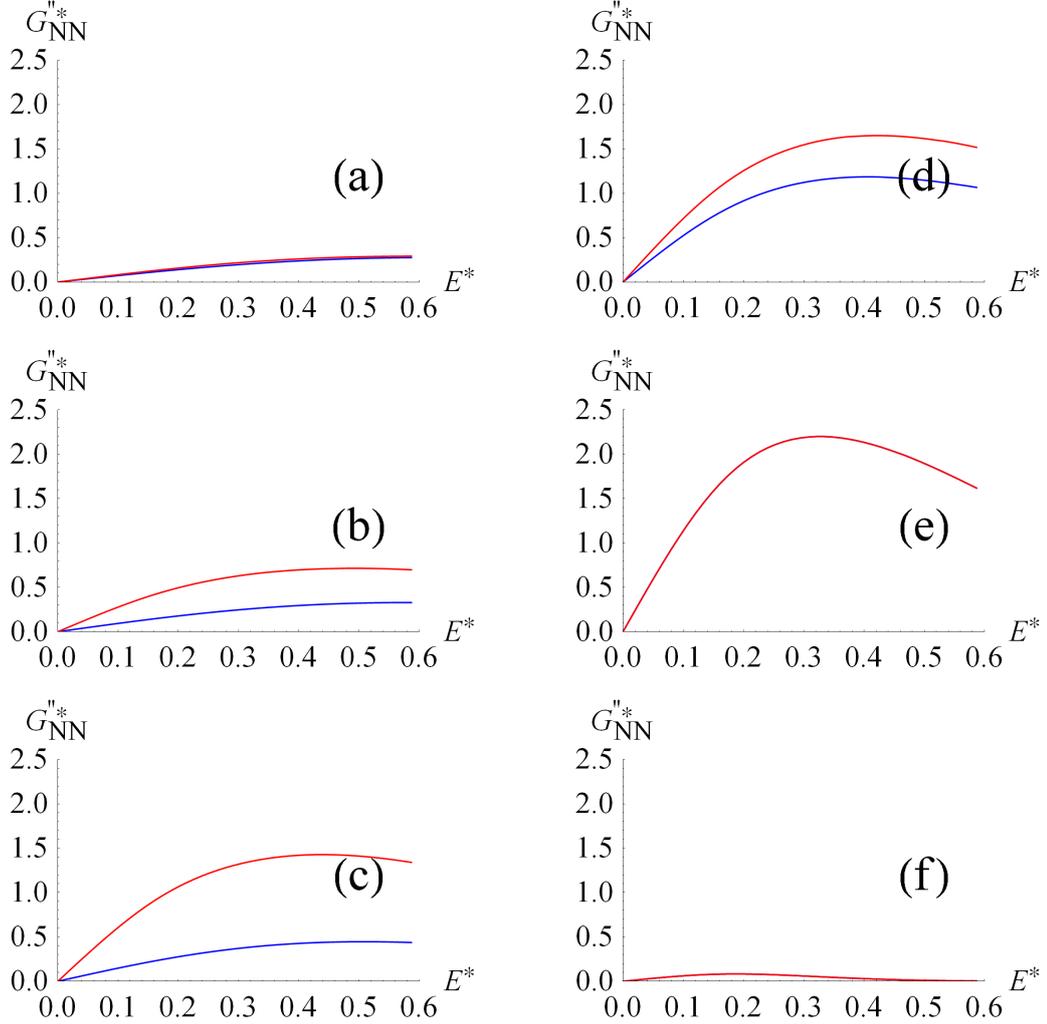


Abbildung 7.15: Energieabhängige transversale Teilchenstrom-Spektralfunktion $G''_{JJ+}^{\perp*} := \frac{2m}{(2F+1)} G''_{JJ+}^{\perp, \text{LDA}}$ für Spin-1-Bosonen in einer harmonischen Falle in LDA-Näherung, bei fester Magnetisierung $M^* = 0$ (blau) und $M^* = 0,7$ (rot), fester Anregungswellenzahl $q^* = 0,4$, Teilchenzahl $N = 10^6$ und Fallenfrequenz $\omega_1^* = \omega_2^* = 2\omega_3^* = 4N^{-1/3}$ sowie fester Temperatur $T^* = 1.30$ (a), 1.17 (b), 0.988 (c), 0.893 (d), 0.598 (e), 0.0940 (f).

Die Abb. 7.15 zeigt die transversale Teilchenstrom-Spektralfunktion von neutralen und Spinor-Bosonen in einem harmonischen Potential in LDA-Näherung als Funktion der Energie, bei fester Anregungswellenzahl und verschiedenen Temperaturen. Auch das transversale Teilchenstromspektrum von Spinor-Bosonen, liegt, anders als im homogenen Fall, bei allen Temperaturen oberhalb des Spektrums neutraler Bosonen - obwohl die Kondensatdichte für Spinor-Bosonen größer ist, was auf den in Abschnitt 7.2.1 diskutierten

Ursachen beruht. Dies verdeutlicht die beiden konkurrierenden Effekte: Einerseits nimmt die transversale Stromkorrelationsfunktion mit zunehmender Kondensatdichte ab, weil der Faktor k^2 denselben unterdrückt, andererseits ist der mit der lokalen Kondensatdichte gewichtete Anteil aufgrund erhöhter Konzentration derselben im Fallenzentrum betont.

7.3 Fermionen

Die oben ausgeführten Berechnungen enthalten mit $\eta = -1$ wieder automatisch den Fall von Fermionen. Es soll jetzt nicht der Einfluss des Fallenpotentials auf die in Kapitel 6 dargestellten Ergebnisse im Einzelnen diskutiert werden, da die Unterschiede zwischen Bosonen und Fermionen einerseits in den Kapiteln 3–6 deutlich wurden, andererseits der Einfluss des Fallenpotentials natürlich qualitativ derselbe wie für Bosonen ist. Stattdessen soll hier noch auf den Grenzfall am Temperaturnullpunkt Bezug genommen werden, wo die Effekte der Quantenstatistik am deutlichsten ans Licht treten. In Kapitel 6 wurde bereits festgestellt, dass ideale Fermi-Gase mit mehr als zwei Spinfreiheitsgraden bei $T = 0$ und hinreichend hoher Magnetisierung eine Art Bandstruktur mit Bandlücken ausbilden: Die höheren Zeeman Zustände werden sukzessive ausgeschlossen. Es wird jetzt der analoge Fall von Fermionen im harmonischen Fallenpotential betrachtet.

Mit (6.2) kann aus (7.12) und (7.14), wie in Abschnitt 6.1.3, folgendes Gleichungssystem bei $T = 0$ abgeleitet werden:

$$\sum_{\sigma=-F+i}^F (\varepsilon_F + \alpha_0 \sigma)^3 = c \quad (7.53)$$

$$\sum_{\sigma=-F+i}^F \sigma (\varepsilon_F + \alpha_0 \sigma)^3 = M^* c \quad (7.54)$$

Darin bezeichnet jetzt $c := N \left(\frac{\hbar \sqrt{\omega^2}}{k_B} \right)^3$ und i wieder den maximalen Wert von σ , für den $\mu|_{T=0} + \alpha|_{T=0} (-F + \sigma) < 0$ gilt. Einsetzen der Bedingungen $\mu = (F - i + 1)\alpha$ in (7.53) und (7.54) liefert wieder die kritischen Magnetisierungen

$$M_{\text{cr}}^{(i)} = \frac{H_{2F-i+1}^{(-4)}}{H_{2F-i+1}^{(-3)}} - F \quad (7.55)$$

durch die mit $M^{(i-1)} \leq M \leq M^{(i)}$ der Wert von i bei gegebener Magnetisierung festgelegt ist. Wie schon für homogene Fermionensysteme mit Spin $F \geq \frac{3}{2}$ resultiert für dieselben auch im harmonischen Potential ein sukzessiver Besetzungsausschluss aller, außer der beiden energetisch günstigsten Zeeman-Zustände.

Für Spin- $\frac{1}{2}$ -Systeme können (7.53) und (7.54) analytisch aufgelöst werden. Dies führt auf:

$$\varepsilon_F = \frac{\varepsilon_F^0}{2} \left[(1 + 2M^*)^{\frac{1}{3}} + (1 - 2M^*)^{\frac{1}{3}} \right] \quad (7.56)$$

$$\alpha = \varepsilon_F^0 \left[(1 + 2M^*)^{\frac{1}{3}} - (1 - 2M^*)^{\frac{1}{3}} \right] \quad (7.57)$$

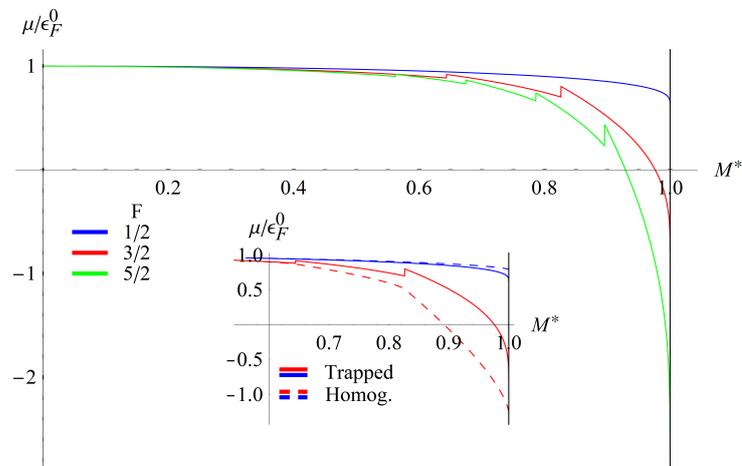


Abbildung 7.16: Reduziertes magnetisierungsabhängiges chemisches Potential μ/ε_F^0 bei $T = 0$ für Fermionen mit Spin $\frac{1}{2}$ (blau), Spin $\frac{3}{2}$ (rot) und Spin $\frac{5}{2}$ (grün) im harmonischen Fallenpotential. Die eingelegte Abbildung zeigt den Vergleich mit homogenen Spin- $\frac{3}{2}$ -Fermionen.

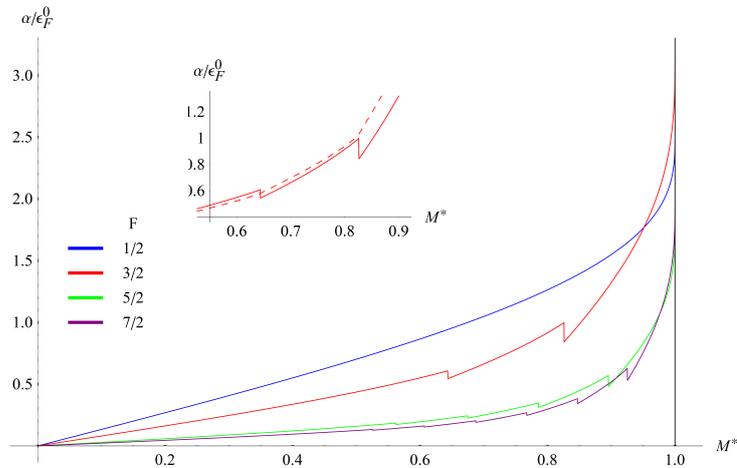


Abbildung 7.17: Innere magnetische Suszeptibilität: Reduziertes Magnetfeld α/ϵ_F^0 als Funktion der reduzierten Magnetisierung $M^* = \frac{M}{n\mu_B g_F}$ für ideale Fermionen mit Spin $\frac{1}{2}$ (blau), Spin $\frac{3}{2}$ (rot), Spin $\frac{5}{2}$ (grün) und Spin $\frac{7}{2}$ (violett) im harmonischen Fallenpotential. Die eingefügte Abbildung zeigt den Vergleich mit homogenen Spin- $\frac{3}{2}$ -Fermionen.

Die Abbildungen 7.16 und 7.17 zeigen die Sprünge im chemischen Potential und im induzierten Magnetfeld bei $T = 0$ als Folge des sukzessiven Besetzungsausschlusses der höheren Zeeman-Zustände. Das Energiespektrum idealer Fermionen mit mehr als zwei Spinfreiheitsgraden ist bei $T = 0$ noch kontinuierlich, bildet aber bei der kritischen Magnetisierung $M = M_{\text{cr}}^{(1)}$ eine Art Bandlücke im Spektrum aus, welche die Besetzung des höchsten Zeeman-Zustandes ausschließt. Dieser Besetzungsausschluss führt im homogenen Fall zu qualitativen Veränderungen des chemischen Potentials und der magnetischen Suszeptibilität, bei Anwesenheit eines harmonischen Fallenpotentials sogar zu sprunghaften Veränderungen. Diese übertragen sich natürlich auf die Dynamik und sind deshalb, etwa mithilfe der Methode der Bragg-Spektroskopie für hinreichend tiefe Temperaturen im dynamischen Strukturfaktor messbar.

Interessant ist auch die lokale Dichte bei $T = 0$, die mit (6.2) sofort aus (7.39) folgt. Mithilfe der Abkürzung

$$G_\sigma(\mathbf{x}) := \mu + \alpha\sigma - E_0 - U(\mathbf{x}) \quad (7.58)$$

kann sie in folgender Form geschrieben werden:

$$C_{0\sigma}(\mathbf{x}) = \frac{1}{N\Gamma(5/2)} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \theta(G_\sigma(\mathbf{x})) G_\sigma^{\frac{3}{2}}(\mathbf{x}) \quad (7.59)$$

Auch hierin spiegelt sich also der Besetzungsausschluss der höheren Zeeman-Niveaus bei

hohen Magnetisierungen wider. Mit (6.2) kann damit auch ein analytisches Ergebnis der lokalen Dichtespektralfunktion aus (7.46) abgeleitet werden. Mit $\Gamma(2) = 1$ gilt:

$$\begin{aligned}
G_{N,N^+}(\mathbf{q}, E, \mathbf{x}) &= \frac{m^{\frac{3}{2}}}{2\hbar^3(2\pi)^2\sqrt{\varepsilon_{\mathbf{q}}}} \\
&\times \left[\sum_{\sigma=-F}^F \theta\left(G_{\sigma}(\mathbf{x}) - \frac{(E + \varepsilon_{\mathbf{q}})^2}{4\varepsilon_{\mathbf{q}}}\right) \cdot \left(G_{\sigma}(\mathbf{x}) - \frac{(E + \varepsilon_{\mathbf{q}})^2}{4\varepsilon_{\mathbf{q}}}\right) \right. \\
&\left. - \sum_{\sigma=-F}^F \theta\left(G_{\sigma}(\mathbf{x}) - \frac{(E - \varepsilon_{\mathbf{q}})^2}{4\varepsilon_{\mathbf{q}}}\right) \cdot \left(G_{\sigma}(\mathbf{x}) - \frac{(E - \varepsilon_{\mathbf{q}})^2}{4\varepsilon_{\mathbf{q}}}\right) \right] \quad (7.60)
\end{aligned}$$

Hieraus kann das für homogene Fermionen gültige $T = 0$ -Ergebnis (6.18) mit $C(\mathbf{x}) = \frac{1}{V}$ durch Ausführen des Grenzfalls $\omega \rightarrow \mathbf{0}$ und $E_0 \rightarrow 0$ und Einsetzen in (7.36) leicht reproduziert werden.

Einsetzen von (7.59) und (7.60) in (7.36) liefert schließlich die Teilchendichte-Spektralfunktion idealer Spinor-Fermionen in einem harmonischen Potential bei $T = 0$ in LDA-Näherung:

$$\begin{aligned}
G_{N,N^+}^{\text{LDA}}(\mathbf{q}, E) &= \frac{m^3}{3 \cdot 2^{5/2} N \pi^4 \hbar^6 \sqrt{\varepsilon_{\mathbf{q}}}} \cdot \int d^3x \left\{ \left(\sum_{\sigma=-F}^F \theta(G_{\sigma}(\mathbf{x})) G_{\sigma}^{\frac{3}{2}}(\mathbf{x}) \right) \right. \\
&\times \sum_{\sigma=-F}^F \left[\theta\left(G_{\sigma}(\mathbf{x}) - \frac{(E + \varepsilon_{\mathbf{q}})^2}{4\varepsilon_{\mathbf{q}}}\right) \cdot \left(G_{\sigma}(\mathbf{x}) - \frac{(E + \varepsilon_{\mathbf{q}})^2}{4\varepsilon_{\mathbf{q}}}\right) \right. \\
&\left. \left. - \theta\left(G_{\sigma}(\mathbf{x}) - \frac{(E - \varepsilon_{\mathbf{q}})^2}{4\varepsilon_{\mathbf{q}}}\right) \cdot \left(G_{\sigma}(\mathbf{x}) - \frac{(E - \varepsilon_{\mathbf{q}})^2}{4\varepsilon_{\mathbf{q}}}\right) \right] \right\} \quad (7.61)
\end{aligned}$$

Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Diplomarbeit wurden ideale Quantengase mit $2F + 1$ Spinfreiheitsgraden vorwiegend mithilfe des Formalismus der Greenschen Funktionen untersucht. Dabei fanden Eigenschaften der Gleichgewichtsthermodynamik und der Dynamik, zuerst für homogene Systeme, Betrachtung. Später wurden die thermodynamischen Resultate im Rahmen einer semiklassischen Näherung und einige der dynamischen Ergebnisse mit Hilfe einer LDA-Näherung auf Systeme in einem harmonischen Potential erweitert. Wo nicht anders bekundet, wird geglaubt, dass die folgend angeführten Ergebnisse neu sind.

Da die Magnetisierung in Experimenten mit Spinor-Bosonen ein kontrollierbarer Parameter ist, konnte die üblicherweise zur Bestimmung des chemischen Potentials verwendete Teilchenzahlidentität um eine Identität der Magnetisierung ergänzt werden. Durch Hinzunahme der stationären Gross-Pitaevskii-Gleichung für jede der $2F + 1$ -Komponenten des Ordnungsparameters konnte ein vollständiges Gleichungssystem zur Bestimmung der $2F + 3$ unbekanntenen Größen, nämlich der $2F + 1$ -Komponenten der Bose-Einstein-Kondensatdichte, des chemischen Potentials und des induzierten Magnetfeldes aufgestellt werden. Diese Beschreibung ist trotz Verwendung der Gross-Pitaevskii-Gleichung im thermodynamischen Limes exakt (vgl. Abschnitt 3.2.2). Insbesondere konnte hieraus das exakte T - M -Phasendiagramm berechnet werden. Der Spezialfall $F = 1$ reproduziert das bekannte Ergebnis [46, 47, 49]. Dabei zeigte sich, dass in Folge der Spinfreiheitsgrade zwei unterschiedliche Kondensatphasen vorliegen. Die „ferromagnetische“ Phase, in der die Kondensation mit dem tiefsten Zeeman-Zustand beginnt und die „antiferromagnetische“ Phase in der alle Spinzustände simultan kondensieren. Die obere kritische Temperatur wurde numerisch ermittelt und steigt fast linear mit der Magnetisierung an, und zwar desto stärker, je höher der Teilchenspin ist. Mit Hilfe der Robinson-Formel wurden analytische Ausdrücke der führenden Ordnung abgeleitet. Es wurde festgestellt, dass sich bei Vorhandensein eines harmonischen Potentials die Sensibilität der kritischen Temperatur in der Magnetisierung (im linearen Bereich je nach Spin auf 30 – 44%) reduziert. Für die untere kritische Temperatur liegt ein analytisches Resultat vor. Sie fällt mit steigender Magnetisierung ab und ist unabhängig vom Teilchenspin. Anschließend wurde die Kondensatdichte und die thermische Besetzung der Zeeman-Zustände berechnet. Auch hier sind die Ergebnisse im Spezialfall $F = 1$ bekannt [46, 47, 49]. Desweiteren wurden exakte Resultate des chemischen Potentials und der nichtlinearen inneren magnetischen Suszeptibilität berechnet. Hierbei wurde festgestellt, dass magnetische Momente im Kondensatanteil keinen Beitrag zum Magnetfeld leisten, in der antiferromagnetischen Phase ein Meißner-Ochsenfeld-Effekt ($\chi = -1$) vorliegt und sich bei hoher Temperatur ein Curie-Verhalten $B \propto MT$ zeigt (vgl. hierzu auch [53]). Durch Linearisieren der magnetischen Suszeptibilität wurde das aus Ref. [53] bekannte Ergebnis der linearen magnetischen Suszeptibilität reproduziert und auf Spinor-Bosonen im harmonischen Potential erweitert. Es wurde festgestellt, dass im homogenen Fall an beiden Phasengrenzen ein Phasenübergang von 3.Ordnung und für Bosonen im harmonischen Potential ein Phasenübergang 2.Ordnung vorliegt.

Für Spinor-Fermionen konnten indessen exakte, numerische Resultate des chemischen Potentials und der nichtlinearen Suszeptibilität ermittelt werden. Zudem wurden analytische Ergebnisse des exakten chemischen Potentials magnetisierter Fermionen und der magnetischen Suszeptibilität bei $T = 0$ berechnet. Dabei konnte für Fermionen mit mehr als zwei Spinfreiheitsgraden für hinreichend hohe Magnetisierungen ein sukzessiver Besetzungsausschluss aller, außer der tiefsten beiden Zeeman-Niveaus festgestellt werden. Dieselben führen zu qualitativen Veränderungen der thermodynamischen Eigenschaften.

Die dynamischen Berechnungen ergaben für homogene Quantengase exakte Ausdrücke für die Magnetisierungs- und Teilchendichte-Spektralfunktion idealer Spinor-Quantengase bei endlichen Temperaturen. Der Spezialfall spinentarteter Quantengase reproduziert dabei das bekannte Ergebnis [32, 62, 34]. Hierbei zeigte sich, dass das BEK durch einen Delta-Peak im Phononen- und im Magnonenspektrum repräsentiert ist. Ebenso konnten der longitudinale und der transversale Anteil von Teilchen- und Magnetisierungsstrom-Spektralfunktion exakt berechnet werden. Zum transversalen Anteil der Strom-Spektralfunktionen trägt der Kondensatanteil nicht bei. Das Spektrum verschwindet deshalb für Bosonen im Grenzfall $T \rightarrow 0$. Die Teilchenstromspektren gehen für spinentartete Quantengase in die bekannten Ausdrücke [34] über. Es zeigte sich, dass die erwähnten Spektralfunktionen formal invariant gegenüber der Existenz eines Magnetfeldes sind. Qualitative Unterschiede zwischen spinentarteten Bosonen und Spinor-Bosonen bezüglich dynamischer Größen wie dem Strukturfaktor, und ebenso Unterschiede die die Nicht-Gleichgewichtsthermodynamik der Systeme betreffen, rühren deshalb von Unterschieden in der Gleichgewichtsthermodynamik her. Es ergaben sich bei hohen Temperaturen quantitative Unterschiede, in einem mittleren Temperaturbereich qualitative Unterschiede, als Folge des Anstiegs der kritischen Temperatur mit der Magnetisierung, und überhaupt keine Unterschiede bei tiefen Temperaturen aufgrund des „Meißner-Effektes“.

Für Fermionen konnte dagegen der bekannte exakte analytische Ausdruck der Teilchendichte-Spektralfunktion reproduziert und auf Spinor-Systeme, sowie im Rahmen der LDA-Näherung auch auf inhomogene Systeme in einem harmonischen Fallenpotential erweitert werden. Hierbei konnte gezeigt werden, dass der besagte Besetzungsausschluss auch den dynamischen Strukturfaktor betrifft, sodass derselbe mithilfe der Methode der Bragg-Spektroskopie gemessen werden könnte.

Ausgehend von den Spektralfunktionen konnten die statischen Suszeptibilitäten berechnet werden. Dabei zeigte sich eine Divergenz der Dichtesuszeptibilität als Artefakt der Idealisierung. Die transversal statische Suszeptibilität bleibt dagegen bei allen Temperaturen endlich. Anhand von letzterer konnte nachgewiesen werden, dass die superfluide Dichte idealer Spinor-Bosonen ebenso wie es für spinentartete Bosonen bekannt ist gleich der Kondensatdichte ist. In der antiferromagnetischen Phase verschwindet die kritische Geschwindigkeit und Spinor-Bosonen bilden ein metastabiles Superfluid. In der ferromagnetischen Phase ist die kritische Geschwindigkeit dagegen negativ, so dass kein Superfluid vorliegt. Die Ergebnisse der Dichte- und Stromspektralfunktionen wurden im Rahmen

einer LDA-Näherung auf Quantengase in einem harmonischen Potential erweitert.

In Abschnitt 4.2.4 wurden die Konsequenzen der Idealisierung deutlich und es wurde klar, dass die Berücksichtigung von Wechselwirkungen zu qualitativen Veränderungen der Dynamik führen müssen. Schon 1947 zeigte N. N. Bogoliubov [65], dass schon beliebig schwache Wechselwirkungen im Falle eines vorliegenden Bose-Einstein Kondensats qualitative Veränderungen der Systemeigenschaften bewirken. In der Literatur existieren widersprüchliche Auffassungen darüber, ob die Berücksichtigung ferromagnetischer Zweiteilchenwechselwirkungen, wie sie für ^{87}Rb gegeben sind, zur Existenz einer dritten Kondensatphase führt [46, 47]. Insbesondere bewirken Wechselwirkungen einen linearen Anteil im Einteilchenspektrum, wodurch sich die Superfluidität des Bose-Gases stabilisiert. Aus diesen Gründen erscheint eine Erweiterung hinsichtlich einer Berücksichtigung von Wechselwirkungseffekten interessant. Auch spielt der quadratische Zeeman-Effekt eine wesentliche Rolle, sobald starke, externe Magnetfelder vorliegen. In Experimenten zur Spindynamik, die zu den gut messbaren Eigenschaften von Spinor-Kondensaten gehört, werden solche Felder gebraucht. Dies macht die Erweiterung um den quadratischen Zeeman-Term attraktiv.

Anhang A

Theoretische Grundlagen

Dieses Kapitel ist kein Originaldokument. Die folgende Darstellungen basieren auf folgenden Referenzen [56, 66, 54, 67, 68].

A.1 Motivation der verwendeten Methode

Die Methode der Greenschen Funktionen ist ein allgemeiner und mikroskopischer Zugang zu Vielteilchenproblemen. In einer Green-Funktion tritt unmittelbar das Spektrum der untersuchten elementaren Anregungen auf, so dass sie gleichsam die Sprache darbieten in der diese Anregungen beschrieben werden.

Greensche Funktionen das sind thermodynamische Gleichgewichts Erwartungswerte eines Produktes aus Operatoren, die zu zwei verschiedenen Zeiten ausgewertet werden. Ist die retardierte Einteilchen Green-Funktion eines Vielteilchensystems bekannt, folgt die gesamte Gleichgewichtsthermodynamik desselben. Die Kubo-Formel (4.3) liefert die Antwort oder Reaktion eines Systems auf Störungen in Form von Nichtgleichgewichtserwartungswerten. Der Systemanteil der Integranden dieser Störreihe sind durch Potenzen retardierter Green-Funktionen gegeben. Aus ihr folgen in linearer Näherung so interessante mikroskopische Informationen wie die magnetische Spin-Suszeptibilität und die Dielektrizitätsfunktion.

In Kapitel 2 wird gezeigt, dass für ideale Systeme die retardierte Ein- und Zweiteilchen-Green-Funktion analytisch berechnet werden kann. Hierzu wird eine Bewegungsgleichung abgeleitet und mithilfe allgemeingültiger Kommutatoridentitäten gelöst. Es erhebt sich also die Frage, warum neben der retardierten Green-Funktionen, die jede wünschenswerte Information liefert noch weitere formal ähnliche Größen definiert werden? Für wechsel-

wirkende Systeme ist die Bewegungsgleichung nicht mehr exakt lösbar. Dann müssen (unkontrollierbare, mitunter grobe) Näherungsverfahren zur Entkopplung derselben verwendet werden. Eine mehr systematische Behandlung wechselwirkender Systeme kann mithilfe der zeitabhängigen Störungstheorie entwickelt werden. Eine solche wird allerdings mitunter sehr aufwändig. Die Diagrammtechnik ist eine Methode sich aufhebende Terme aus den Berechnungen zu eliminieren ohne sie ausrechnen zu müssen. Sie bedeutet also die Automatisierung eines Großteils der Berechnungen. Es bleiben nur die physikalisch wesentlichen Terme bestehen. Die Diagrammtechnik beruht wesentlich auf dem Wickschen Theorem, mit dem sich zeitgeordnete Erwartungswerte aus Operatorprodukten in Elementarere zerlegen lassen. Da die retardierte Green-Funktion keine Zeitordnung enthält, ist als geeignete Größe zur störungstheoretischen Behandlung wechselwirkender Systeme eine zeitgeordnete Green-Funktion, die sogenannte kausale Green-Funktion zu definieren. Ein weiterer Vorteil dieser Größe ist, dass sich mithilfe desselben Theorems, alle zur Beschreibung eines Vielteilchensystems relevanten, kausalen Green-Funktionen aus einer bestimmten, der kausalen Einteilchen-Green-Funktion bestimmen lassen. Von der kausalen Green-Funktion kann in jedem Fall leicht auf die retardierte Green-Funktion transformiert werden, so dass die genannten Vorteile bestehen bleiben. Dieser störungstheoretische Formalismus ist jedoch nur am absoluten Temperaturnullpunkt, wo der thermodynamische Gleichgewichtserwartungswert durch den Grundzustand gegeben ist sinnvoll erklärt. Für endliche Temperaturen benötigt man ferner die Matsubara-Funktion um eine Diagrammtechnik mit denselben Vorteilen zu formulieren. Aus dieser erhält man die retardierte Green-Funktion direkt durch analytisches Fortsetzen.

A.2 Definitionen

Mithilfe von

$$\eta := \begin{cases} 1 & \text{Bosonen} \\ -1 & \text{Fermionen} \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

lassen sich die Greenschen Funktionen für Systeme identischer Teilchen einheitlich definieren.

Retardierte Green-Funktion:

$$G_{A,B}^{\text{ret}}(t, t') := -i\Theta(t - t') \langle [\hat{A}^D(t), \hat{B}^D(t')]_{-\eta} \rangle \quad (\text{A.2})$$

Avancierte Green-Funktion

$$G_{A,B}^{\text{av}}(t, t') := +i\Theta(t' - t) \langle [\hat{A}^D(t), \hat{B}^D(t')]_{-\eta} \rangle \quad (\text{A.3})$$

Kausale Green-Funktion

$$G_{A,B}^{\text{c}}(t, t') := -i \langle \hat{T}_\epsilon(\hat{A}^D(t) \hat{B}^D(t')) \rangle \quad (\text{A.4})$$

Spektraldichte

$$G''_{A,B}(t, t') := \frac{1}{2\pi} \langle [\hat{A}^D(t), \hat{B}^D(t')]_{-\eta} \rangle \quad (\text{A.5})$$

Darin bezeichnet $\langle \dots \rangle = \frac{1}{Z_G} \text{Tr}(e^{-\beta \hat{H}_0} \cdot \dots)$ den Erwartungswert eines N -Teilchensystems im thermodynamischen Gleichgewicht mit der Zustandssumme $Z_G = \text{Tr}(e^{-\beta \hat{H}_0})$. $\hat{O}^D(t) := e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \hat{O} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t}$ den Operator im Dirac'schen Wechselwirkungsbild zum Operator \hat{O} im Schrödinger Bild. Ferner ist \hat{H}_0 der Operator des ungestörten thermodynamischen Gleichgewichtssystems im Schrödinger Bild. \hat{T}_η ist der Wicksche Zeitordnungsoperator der durch $\hat{T}_\eta(\hat{A}(t)\hat{B}(t')) := \Theta(t-t')\hat{A}(t)\hat{B}(t') + \eta\Theta(t'-t)\hat{B}(t')\hat{A}(t)$ definiert ist. Die Operatoren \hat{A} und \hat{B} sind dabei beliebig und können natürlich auch Produkte aus Operatoren repräsentieren.

A.3 Eigenschaften und Theoreme

Die Spektraldarstellung von Spektraldichte und Greenschen Funktionen gewährt Einblick in die physikalische Bedeutung derselben. So werden die isolierten Singularitäten der Greenschen Funktionen als elementare Anregungsenergien des Systems zu interpretieren sein. Das Spektraltheorem liefert zu jeder Spektralfunktion die Korrelationsfunktionen der enthaltenen Operatoren. Schließlich ermöglicht die Bewegungsgleichung eine im Vergleich zur Auswertung der Definition effektivere Berechnung von retardierter und avancierter Green-Funktion.

A.3.1 Homogenität in der Zeit

Die Größe

$$\langle \hat{A}^D(t)\hat{B}^D(t') \rangle \quad (\text{A.6})$$

heißt Korrelationsfunktion der Operatoren \hat{A} und \hat{B} . Sie ist homogen in der Zeit, d.h. es gilt:

$$\langle \hat{A}^D(t)\hat{B}^D(t' + t_0) \rangle = \langle \hat{A}^D(t-t')\hat{B}^D(t_0) \rangle \quad (\text{A.7})$$

Dies ist durch Verwendung der zyklischen Invarianz der Spur wie folgt einzusehen:

$$\begin{aligned} \langle \hat{A}^D(t)\hat{B}^D(t' + t_0) \rangle &= \frac{1}{Z_G} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{H}_0} e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \hat{A} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 (t-t'-t_0)} \hat{B} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 (t'+t_0)} \right\} \\ &= \frac{1}{Z_G} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{H}_0} e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 (t-t')} \hat{A} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 (t-t')} e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t_0} \hat{B} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t_0} \right\} \\ &= \langle \hat{A}^D(t-t')\hat{B}^D(t_0) \rangle \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Damit sind auch die in (A.2)–(A.5) definierten Green'schen Funktionen sowie die Spektraldichte homogen in der Zeit.

A.3.2 Spektraldarstellung

Die Fourier Transformierte der Spektraldichte $G''_{A,B}(t, t') = G''_{A,B}(t - t')$ heißt Spektralfunktion $G''_{A,B}(E)$. Sie lautet:

$$G''_{A,B}(E) = \int_{-\infty}^{\infty} G''_{A,B}(t - t') e^{\frac{i}{\hbar} E(t-t')} d(t - t') \quad (\text{A.9})$$

Es sei fürs Folgende angenommen, dass das Eigenwertproblem $\hat{H}_0 |E_n\rangle = E_n |E_n\rangle$ gelöst ist und $|E_n\rangle$ eine vollständige Orthonormalbasis aus Eigenzuständen von \hat{H}_0 im Fock-Raum ist. E_n sei das n -te Energieniveau des Gesamtsystems im thermodynamischen Gleichgewicht.¹ Um Missverständnissen vorzubeugen, sei noch betont, dass die Zustände $|E_n\rangle$ die üblichen N -Teichen Zustände in Besetzungszahldarstellung repräsentieren und keinesfalls mit den Zuständen einzelner Atome identifiziert werden können. Dann kann die Spektralfunktion wie folgend gezeigt, spektral dargestellt werden. Betrachte:

$$\begin{aligned} Z_G \langle \hat{A}^D(t) \hat{B}^D(t') \rangle &= \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{H}} \hat{A}^D(t) \hat{B}^D(t') \right\} = \sum_n \langle E_n | e^{-\beta \hat{H}_0} \hat{A}^D(t) \hat{B}^D(t') | E_n \rangle \\ &= \sum_{m,n} \langle E_n | \hat{A} | E_m \rangle \langle E_m | \hat{B} | E_n \rangle e^{\frac{i}{\hbar} (E_n - E_m)(t-t')} e^{-\beta E_n} \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Im letzten Schritt wurde die Vollständigkeitsrelation der Eigenzustände $|E_n\rangle$ ausgenutzt. Vertauschen der (skalaren) Matrixelemente $\langle E_n | \hat{A} | E_m \rangle$ und $\langle E_m | \hat{B} | E_n \rangle$ anschließende Umbenennung $n \leftrightarrow m$ und Einsetzen von $e^{-\beta E_m} = e^{-\beta E_n} e^{-\beta(E_m - E_n)}$ erhält man:

$$Z_G \langle \hat{A}^D(t) \hat{B}^D(t') \rangle = \sum_{m,n} \langle E_n | \hat{B} | E_m \rangle \langle E_m | \hat{A} | E_n \rangle e^{-\beta E_m} e^{-\frac{i}{\hbar} (E_n - E_m)(t-t')} \quad (\text{A.11})$$

Alternativ folgt ohne diese Schritte aus (A.10) sofort

$$Z_G \langle \hat{B}^D(t') \hat{A}^D(t) \rangle = \sum_{m,n} \langle E_n | \hat{B} | E_m \rangle \langle E_m | \hat{A} | E_n \rangle e^{-\beta E_n} e^{-\frac{i}{\hbar} (E_n - E_m)(t-t')} \quad (\text{A.12})$$

Einsetzen von (A.11) und (A.12) in die Definition der Spektraldichte (A.5) ergibt nach Teilen durch Z_G :

$$G''_{A,B}(t - t') = \frac{1}{2\pi Z_G} \sum_{m,n} \langle E_n | \hat{B} | E_m \rangle \langle E_m | \hat{A} | E_n \rangle e^{-\beta E_n} e^{-\frac{i}{\hbar} (E_n - E_m)(t-t')} \left[e^{-\beta(E_m - E_n)} - \eta \right] \quad (\text{A.13})$$

¹Es genügt, zu wissen, dass eine solche Basis aus Eigenzuständen existiert, damit sichergestellt ist, dass die folgend abgeleitete Spektraldarstellung sinnvoll erklärt ist. Keinesfalls muss sie in expliziter Form bekannt sein.

Weiteres Einsetzen in (A.9) führt mit

$$\int_{-\infty}^{\infty} d(t-t') e^{\frac{i}{\hbar} E(t-t')} e^{-\frac{i}{\hbar} (E_n - E_m)(t-t')} = 2\pi\hbar \delta(E - (E_n - E_m)) \quad (\text{A.14})$$

zum Ergebnis:

$$G''_{A,B}(E) = \frac{\hbar}{Z_G} \sum_{m,n} \langle E_n | \hat{B} | E_m \rangle \langle E_m | \hat{A} | E_n \rangle e^{-\beta E_n} (e^{\beta E} - \eta) \delta(E - (E_n - E_m)) \quad (\text{A.15})$$

Erneute Umbenennung $n \leftrightarrow m$ sowie abermalige Vertauschung der Matrixelemente liefert mit $e^{-\beta E_m} (e^{\beta E} - \eta) = e^{-\beta E_n} (1 - \eta e^{-\beta(E_m - E_n)})$ die häufiger gebrauchte Version der Spektraldarstellung der Spektralfunktion:

$$G''_{A,B}(E) = \frac{\hbar}{Z_G} \sum_{m,n} \langle E_n | \hat{A} | E_m \rangle \langle E_m | \hat{B} | E_n \rangle e^{-\beta E_n} (1 - \eta e^{-\beta E}) \delta(E - (E_m - E_n)) \quad (\text{A.16})$$

Die Spektralfunktion ist also eine Summe gewichteter Delta-Funktionen in deren Argumenten die möglichen elementaren Anregungsenergien des Systems stehen. Ihr Wert an der Stelle E gibt also denjenigen Anteil der Energie des Systems an, der im Intervall $(E, E + dE)$ steckt. In diesem Sinne ist es zu verstehen, dass n -Teilchengrößen die Information über das n -Teilchenanregungsspektrum des Systems tragen.

A.3.3 Spektraltheorem

Die Spektraldarstellung der Spektralfunktion (A.15) lässt sich mit (A.14) für $E \neq 0$ oder $\eta = -1$ in folgenden Ausdruck überführen:

$$\begin{aligned} \frac{G''_{A,B}(E)}{e^{\beta E} - \eta} &= \frac{1}{2\pi Z_G} \sum_{m,n} \langle E_n | \hat{B} | E_m \rangle \langle E_m | \hat{A} | E_n \rangle e^{-\beta E_n} \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} d(t-t') e^{\frac{i}{\hbar} E(t-t')} e^{-\frac{i}{\hbar} (E_n - E_m)(t-t')} \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

Vertauschen von Integral und Summe, anschließendes Einsetzen von (A.12) auf der rechten Seite und schließliche Identifikation der Fourier Transformaten

$$\langle \hat{B}\hat{A} \rangle(E) = \int_{-\infty}^{\infty} d(t-t') \langle \hat{B}^D(t-t') \hat{A} \rangle e^{\frac{i}{\hbar} E(t-t')} \quad (\text{A.18})$$

führt auf das Spektraltheorem in Energiedarstellung:

$$\langle \hat{B}\hat{A} \rangle (E) = 2\pi \frac{G''_{A,B}(E)}{e^{\beta E} - \eta}; \quad \forall E \neq 0 \quad (\text{A.19})$$

Besonders nützlich ist das Spektraltheorem in Zeitdarstellung, welches unmittelbar durch Fourier Transformation folgt:

$$\langle \hat{B}^D(t')\hat{A}^D(t) \rangle = \frac{1}{\hbar} P \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{G''_{A,B}(E)}{e^{\beta E} - \eta} e^{-\frac{i}{\hbar}E(t-t')} + \delta_{\eta,1}D \quad (\text{A.20})$$

Da (A.19) im Falle $\eta = 1$ an der Stelle $E = 0$ nicht definiert ist, musste einerseits das Hauptwertintegral verwendet und andererseits damit gerechnet werden, dass der $E = 0$ -Beitrag endlich ist. Folglich war eine Konstante zur Korrelationsfunktion zu addieren. Eine Bestimmungsgleichung dieser Konstanten folgt im Prinzip aus der Überlegung, dass, sofern sie einen endlichen Wert annimmt, derselbe sich zwar in der Kommutator Green-Funktionen ($\eta = 1$) aufhebt, aber in der Antikommutator-Green-Funktionen ($\eta = -1$) doppelt auftritt. Da die Greenschen Funktionen auf der reellen Achse nicht definiert sind, muss die Konstante über das Residuum der retardierten Antikommutator-Green-Funktion ermittelt werden

$$D = \frac{1}{2\hbar} \lim_{|E| \rightarrow 0} G_{AB}^{\text{ret}, \eta=-1}(E) \quad (\text{A.21})$$

wobei der Grenzübergang natürlich im Komplexen auszuführen ist. Die statische Korrelationsfunktion zwischen den Schrödingeroperatoren \hat{B} und \hat{A} folgt durch Verwendung der Homogenität in der Zeit (A.7) für den Spezialfall $t = t'$:

$$\langle \hat{B}\hat{A} \rangle = \frac{1}{\hbar} P \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{G''_{A,B}(E)}{e^{\beta E} - \eta} + \delta_{\eta,1}D \quad (\text{A.22})$$

A.3.4 Bewegungsgleichung

Es gilt nach Definition der Delta-Distribution und der Heavysideschen Stufenfunktion

$$\int_{-\infty}^{t-t_1} \delta(t_2) = \begin{cases} 1 & ; t > t_1 \\ 0 & ; t < t_1 \end{cases} = \Theta(t - t_1) \quad (\text{A.23})$$

Daraus folgt mit dem Hauptsatz der Differential und Integralrechnung:

$$\frac{d}{d(t - t_1)} \Theta(t - t_1) = \delta(t - t_1) \quad (\text{A.24})$$

Zusammen mit

$$\frac{\partial\Theta(t-t_1)}{\partial t} = \frac{\partial\Theta(t-t_1)}{\partial(t-t_1)} \frac{\partial(t-t_1)}{\partial t} = \frac{d\Theta(t-t_1)}{d(t-t_1)} \quad (\text{A.25})$$

ergibt sich folgender Ausdruck:

$$\frac{\partial\Theta(t-t_1)}{\partial t} = \delta(t-t_1) \quad (\text{A.26})$$

Betrachte:

$$\frac{d}{dt}G_{AB}^{\text{ret,av}}(t-t_1) = -i\frac{d}{dt}\left(\Theta(t-t_1)\langle[A^D(t), B^D(t_1)]_{-\eta}\rangle\right) \quad (\text{A.27})$$

Mit der Heisenbergschen Bewegungsgleichung für Operatoren

$$\frac{d\hat{A}(t)}{dt} = \frac{[\hat{A}, \hat{H}](t)}{i\hbar} + \left(\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right)(t) \quad (\text{A.28})$$

folgt durch Anwendung der Produktregel, für nicht explizit zeitabhängige Operatoren \hat{A} :

$$i\hbar\frac{d}{dt}G_{AB}^{\text{ret,av}}(t-t_1) = \delta(t-t_1)\langle[A^D(t), B^D(t_1)]_{-\eta}\rangle + G_{[A,H]_{-},B}^{\text{ret,av}}(t-t_1) \quad (\text{A.29})$$

Mit $\delta(t-t') = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}E(t-t')} \frac{dE}{\hbar}$ folgen die Fourier Entwicklungen:

$$G_{A,B}^{\text{ret,av}}(t-t') = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dEG_{A,B}^{\text{ret,av}}(E)e^{-\frac{i}{\hbar}E(t-t')} \quad (\text{A.30})$$

$$\delta(t-t')\langle[A^D(t), B^D(t')]_{-\eta}\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dEe^{-\frac{i}{\hbar}E(t-t')}\langle[\hat{A}, \hat{B}]_{-\eta}\rangle \quad (\text{A.31})$$

Durch Einsetzen derselben in (A.29) folgt nach Vergleich der Integranden die Bewegungsgleichung in Energiedarstellung:

$$EG_{A,B}^{\text{ret,av}}(E) = \hbar\langle[\hat{A}, \hat{B}]_{-\eta}\rangle + G_{[A,H]_{-},B}^{\text{ret,av}}(E) \quad (\text{A.32})$$

Die Bewegungsgleichung ermöglicht die Berechnung der retardierten und der avancierten Green-Funktion. Für alle solchen Systeme, deren Hamiltonoperator vom Einteilchentyp ist (insbesondere also für ideale Systeme), ist sie direkt lösbar. Für alle anderen Systeme lässt sich für $G_{[A,H]_{-},B}^{\text{ret,av}}(E)$ wieder eine i.A. nicht unmittelbar auflösbare Bewegungsgleichung der Form (A.32) ansetzen und für die darin vorkommenden höheren Green-Funktionen wieder eine solche usw. . Es gilt dann, eine geeignete Stelle zu finden, diese Kaskade von Bewegungsgleichungen mithilfe eines Näherungsverfahrens zu entkoppeln.

A.4 Transformationsformeln

Der folgende Abschnitt zeigt, dass zwischen den in (A.2)–(A.5) definierten Größen allgemeingültige, exakte Identitäten bestehen. Die Kramers-Kronig Relationen zeigen, dass Realteil und Imaginärteil der avancierten ebenso wie der retardierten Green-Funktion jeder für sich, die vollständigen Green-Funktionen eindeutig festlegen. Durch solche Identitäten wird das Wesen der Größen (A.2)–(A.5) klarer, offenbaren sie doch die Äquivalenz des physikalischen Gehalts der beteiligten Ausdrücke. Da die Identitäten natürlich auch für alle aus diesen Funktionen aufgebauten Größen gelten, wie etwa die Dielektrizitätsfunktion in linearer Response Näherung, können sie dafür verwendet werden, die erhaltenen Ergebnisse auf Konsistenz zu prüfen.

Die Existenz von Transformationsformeln zwischen allen interessierenden Größen, nämlich den Green-Funktionen, Korrelationsfunktionen und der Spektraldichte, ist von entscheidender Bedeutung für den gesamten Formalismus, da sie sich bezüglich der Effizienz ihrer Bestimmung erheblich unterscheiden können. So ermöglicht etwa die kausale Green-Funktion (für $T > 0$ die Matsubara-Funktion) im Zuge der Anwendbarkeit des Wickschen Theorems eine ökonomische und systematische Störreihenentwicklung in Form der Diagrammtechnik. Andererseits sind retardierte Greenfunktion und Spektralfunktion oft die eigentlich interessierenden Größen, da sie neben der ihnen eigentlichen Aussagekraft, weitere interessante mikroskopische Informationen liefern. Für erstere existieren infolge der Kubo-Formel einfache Relationen zu messbaren Größen wie Dielektrizitätsfunktion, magnetischer Spin-Suszeptibilität und elektrischer Leitfähigkeit. Sie weisen damit direkten Bezug zum Experiment auf. Über das Spektraltheorem liefert dagegen jede Spektralfunktion eine interessante Korrelationsfunktion.

A.4.1 Retardierte und avancierte Green-Funktion aus Spektralfunktion

Vergleich der Definitionen (A.2) und (A.5) liefert:

$$G_{A,B}^{\text{ret}}(t-t') = -2\pi i \Theta(t-t') G_{A,B}''(t-t') \quad (\text{A.33})$$

Die Fourier Transformierte $G_{A,B}^{\text{ret}}(E) = \int_{-\infty}^{\infty} d(t-t') G_{A,B}^{\text{ret}}(t-t') e^{\frac{i}{\hbar} E(t-t')}$ lautet damit

$$G_{A,B}^{\text{ret}}(E) = -2\pi i \int_{-\infty}^{\infty} d(t-t') e^{\frac{i}{\hbar} E(t-t')} \Theta(t-t') G_{A,B}''(t-t') \quad (\text{A.34})$$

Mithilfe der Integraldarstellung der Heavyside'schen Stufenfunktion aus (E.20)

$$\Theta(t-t') = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{e^{-ix(t-t')}}{x+i0^+} \quad (\text{A.35})$$

folgt:

$$G_{A,B}^{\text{ret}}(E) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dE' \frac{G''_{A,B}(E')}{x + i0^+} \underbrace{\left(\int_{-\infty}^{\infty} d(t-t') e^{-\frac{i}{\hbar}(E'-E+\hbar x)(t-t')} \right)}_{=2\pi\hbar\delta(\hbar x - (E-E'))} \quad (\text{A.36})$$

Ausführen des x -Integrals und Ersetzen von $\hbar i0^+$ durch $i0^+$ liefert das Resultat

$$G_{A,B}^{\text{ret}}(E) = \int_{-\infty}^{\infty} dE' \frac{G''_{A,B}(E')}{E - E' + i0^+} \quad (\text{A.37})$$

Die Definitionen (A.2) und (A.3) zeigen, dass die Argumentation für die avancierte Green-Funktion nach Ersetzen von $\Theta(t-t')$ durch $-\Theta(t'-t)$ in (A.34) identisch ist, so dass eine analoge Verknüpfung mit der Spektraldichte resultiert:

$$G_{A,B}^{\text{av}}(E) = \int_{-\infty}^{\infty} dE' \frac{G''_{A,B}(E')}{E - E' - i0^+} \quad (\text{A.38})$$

Einsetzen in (A.15) zeigt, dass auch retardierte und avancierte Green-Funktion eine Spektraldarstellung besitzen:

$$G_{AB}^{\text{ret,av}}(E) = \frac{\hbar}{Z_G} \sum_{m,n} \langle E_n | \hat{B} | E_m \rangle \langle E_m | \hat{A} | E_n \rangle e^{-\beta E_n} \frac{e^{\beta(E_n - E_m)} - \eta}{E - (E_n - E_m) + i0^+} \quad (\text{A.39})$$

Die als elementare Anregungsenergien des Systems interpretierten Energien $E_n - E_m$ stehen jetzt im Nenner. Die Greenschen Funktionen enthalten also die elementaren Anregungsenergien des Systems (das gesamte Anregungsspektrum) als isolierte Singularitäten auf der reellen Energieachse.

A.4.2 Spektralfunktion und Green-Funktionen

Die retardierte Green-Funktion gilt in der oberen komplexen Halbebene. Die avancierte Green-Funktion in der unteren. Mit (A.37) und (A.38) kann man diese beiden Green-Funktionen unter Beschränkung auf reelle Energiewerte formal zu folgender Größe zusammenfassen:

$$G_{AB}^{\text{ret,av}}(E) = \int_{-\infty}^{\infty} dE' \frac{G''_{A,B}(E')}{E - E' \pm i0^+} \quad (\text{A.40})$$

²Konstanten ändern die Qualität von Grenzwerten nicht

Dann kann man allerdings formal ebensogut komplexe Energiewerte zulassen und definieren:

$$G_{A,B}(E) := \int_{-\infty}^{\infty} dE' \frac{G''_{A,B}(E')}{E - E'} \quad (\text{A.41})$$

Die physikalische Energie ist der Realteil dieser formalen Größe E . Mithilfe der Dirac Identität (E.15):

$$\int_{-\infty}^{\infty} dE' \frac{G''_{A,B}(E')}{E - E' \pm i0^+} = \mathfrak{P} \left(\int_{-\infty}^{\infty} dE' \frac{G''_{A,B}(E')}{E - E'} \right) \mp i\pi \int_{-\infty}^{\infty} dE' G''_{A,B}(E') \delta(E - E') \quad (\text{A.42})$$

folgt für den Spezialfall $\Im E \in (0, 0^+)$

$$G_{A,B}^{\text{av}}(E) = G_{A,B}^{\text{ret}}(E) + i\pi G''_{A,B}(E) \quad (\text{A.43})$$

und für $\Im E \in (-0^+, 0)$

$$G_{A,B}^{\text{ret}}(E) = G_{A,B}^{\text{av}}(E) - i\pi G''_{A,B}(E) \quad (\text{A.44})$$

Darin bezeichnet $\mathfrak{P} \int ..$ das Cauchysche Hauptwertintegral. Gemäß (A.9) ist $G''_{A,B}(E)$ stetig in allen Punkten $E \in \mathbb{R}$ Insbesondere gilt damit nach Definition der Stetigkeit auf der gesamten reellen Achse:

$$2G''_{A,B}(E) = G''_{A,B}(E + i0^+) - G''_{A,B}(E - i0^+) \quad (\text{A.45})$$

Daraus folgt mit (A.43) und (A.44):

$$G''_{A,B}(E) = \frac{i}{2\pi} \left[G_{A,B}^{\text{ret}}(E) - G_{A,B}^{\text{av}}(E) \right]; \quad \forall E \in \mathbb{R} \quad (\text{A.46})$$

Damit kann bei bekannter retardierter und avancierter Green-Funktion auf die Spektralfunktion geschlossen werden.

A.4.3 Kramers-Kronig-Relationen

Die retardierte Green-Funktion ist in der oberen komplexen Halbebene eine holomorph und avancierte Green-Funktion in der abgeschlossenen unteren komplexen Halbebene. Für $E \in \mathbb{R}$ ist $E - E' \mp i0^+$ in der oberen/unteren abgeschlossenen Halbebene holomorph. Damit ist auch

$$\frac{G_{AB}^{\text{ret,av}}(E)}{E - E' \mp i0^+} \quad (\text{A.47})$$

in der abgeschlossenen oberen/unteren Halbebene holomorph. Nach der Umlaufzahlversion des Cauchy'schen Integralsatzes gilt für eine Funktion $f(z)$, die auf einem Gebiet

$G \in \mathbb{C}$ holomorph ist, $\oint f(z)dz = 0$ für alle geschlossenen Wege in G . Nach (A.47) gilt damit für alle Wege die ganz in der oberen/unteren abgeschlossenen Halbebene liegen:

$$\oint dE' \frac{G_{AB}^{\text{ret,av}}(E')}{E - E' \mp i0^+} = 0 \quad (\text{A.48})$$

Die Idee ist jeweils, einen Weg γ_1 entlang der reellen Achse zu wählen und diesen mit einem Weg γ_2 im Unendlichen zu schließen. Kann gezeigt werden, dass das Contour Integral entlang γ_2 verschwindet, so muss infolge von (A.48) auch das Integral entlang γ_1 verschwinden: Es sei zu diesem Zweck die Bewegungsgleichung (A.32) betrachtet. Umstellen und Integrieren ergibt:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dE \left(EG_{AB}^{\text{ret,av}}(E) - \hbar \left\langle [\hat{A}, \hat{B}]_{-\eta} \right\rangle \right) = \int_{-\infty}^{\infty} dE G_{[A,H]_-,B}^{\text{ret,av}}(E) \quad (\text{A.49})$$

Mit (A.28) folgt:

$$G_{AB}^{\text{ret,av}}(E) - \hbar \left\langle [\hat{A}, \hat{B}]_{-\eta} \right\rangle = 2\pi\hbar^2 \int_0^{\infty} dt \left\langle [\dot{A}^D(t), B]_{-\eta} \right\rangle \delta(t) \quad (\text{A.50})$$

Mit $\int_0^{\infty} dx \delta(x) f(x) = \frac{f(0)}{2}$ für Funktionen $f(x)$ folgt:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dE \left(EG_{AB}^{\text{ret,av}}(E) - \hbar \left\langle [\hat{A}, \hat{B}]_{-\eta} \right\rangle \right) = \pi\hbar^2 \left\langle [\dot{A}(t=0), B]_{-\eta} \right\rangle \quad (\text{A.51})$$

Folglich konvergiert das Integral auf der linken Seite. Notwendige Bedingung dafür ist

$$\lim_{E \rightarrow \infty} G_{AB}^{\text{ret,av}}(E) \approx \frac{\hbar}{E} \left\langle [A, B]_{-\eta} \right\rangle \quad (\text{A.52})$$

Es existiert also ein $c \in \mathbb{R}$ derart, dass mit $z := \frac{E'}{E-i0^+}$ für einen festen Energiewert E gilt:

$$\oint_{\gamma_2} dE' G_{AB}^{\text{ret,av}}(E) = \text{const} \oint_{\gamma_2} dz \frac{1}{1+z} z \leq \text{const} \cdot \lim_{\rho \rightarrow \infty} \int_0^{\pi} \frac{i\rho e^{i\phi}}{1 + \rho^2 e^{2i\phi}} = 0 \quad (\text{A.53})$$

Im letzten Schritt wurde der Residuensatz verwendet. Damit ist gezeigt, dass:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dE' \frac{G_{AB}^{\text{ret,av}}(E')}{E - E' \mp i0^+} = 0 \quad (\text{A.54})$$

Mithilfe der Dirac Identität (E.15) gilt:

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{-\infty}^{\infty} dE' \frac{G_{AB}^{\text{ret,av}}(E')}{E - E' \mp i0^+} \\ &= \mathfrak{P} \int_{-\infty}^{\infty} dE' \frac{G_{A,B}^{\text{ret}}(E')}{E - E'} \pm i\pi \int_{-\infty}^{\infty} dE' \delta(E - E') G_{AB}^{\text{ret,av}}(E - E') \end{aligned} \quad (\text{A.55})$$

Es folgt:

$$\frac{i}{\pi} \mathfrak{P} \int_{-\infty}^{\infty} dE' \frac{G_{AB}^{\text{ret}}(E')}{(E - E')} = G_{AB}^{\text{ret,av}}(E) \quad (\text{A.56})$$

und

$$\frac{-i}{\pi} \mathfrak{P} \int_{-\infty}^{\infty} dE' \frac{iG_{AB}^{\text{ret,av}}(E')}{E - E'} = G_{AB}^{\text{av}}(E) \quad (\text{A.57})$$

Vergleich der Real- und Imaginärteile liefert Kramers-Kronigs Resultate:

$$\frac{\mp 1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} dE' \frac{\Im G_{AB}^{\text{ret,av}}(E')}{E - E'} = \Re G_{AB}^{\text{ret,av}}(E) \quad (\text{A.58})$$

$$\frac{\pm 1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} dE' \frac{\Re G_{AB}^{\text{ret,av}}(E')}{E - E'} = \Im G_{AB}^{\text{ret,av}}(E) \quad (\text{A.59})$$

Diese Relationen zeigen, dass retardierte und avancierte Green-Funktion durch ihren Imaginärteil ebenso vollständig festgelegt sind wie durch ihren Realteil. Dies bedeutet, dass beide Teile denselben physikalischen Gehalt tragen.

Anhang B

Effektive Wirkung

In diesem Kapitel erfolgt eine formale Ableitung der Gross-Pitaevskii-Gleichung für ideale Systeme. Dies erfolgt zum Teil in Anlehnung an [64] und enthält Elemente aus [69].

Wie in der Landau-Theorie der Phasenübergänge (vgl. [52], [70]) wird der Ordnungsparameter, hier $\Psi_\sigma = \langle \hat{a}_\alpha \rangle$ bzw. $\Psi_\sigma^* = \langle \hat{a}_\alpha^* \rangle$, durch einen Parameter, hier durch virtuelle Stromfelder $j_\alpha(\tau), j_\alpha^*(\tau)$ gegeben, an den Hamiltonoperator angekoppelt. Oberhalb des Phasenübergangs, wo der Ordnungsparameter verschwindet beeinflusst dies den Hamiltonoperator nicht. Anschließend wird die Freie Energie $F(T, V, N, M, j^*, j)$ als Funktion dieser Ströme berechnet. Durch Variablenwechsel mittels Legendre Transformation folgt die Freie Energie als Funktion des Ordnungsparameters $F(T, V, N, M, \Psi^*, \Psi)$ und heißt dann effektive Wirkung Γ . Der im thermodynamischen Gleichgewicht wahrscheinlichste, d.h. der stabile Zustand des Systems ist je nach vorgegeben Parametern durch das Minimum des entsprechenden thermodynamischen Potentials charakterisiert. Die Bestimmungsgleichung für den Ordnungsparameter als einer Funktion von N, V, T, M , kann also durch Extremalisierung der effektiven Wirkung bezüglich des Ordnungsparameters erhalten werden. Mithilfe des Formalismus wird also geprüft, ob das System einen energetischen Vorteil aus einer bestimmten Symmetriebrechung gewinnt. Gegebenfalls ist die entsprechende Ordnung wahrscheinlicher als die alte, und das System verwirklicht dieselbe, indem der Ordnungsparameter einen endlichen Wert erhält.

Die Aufgabe besteht vornehmlich darin, die Freie Energie als Funktion des Ordnungsparameters auszudrücken. Hierzu wird zuerst ein allgemeiner Ausdruck der großkanonischen Zustandssumme eines als gestört aufgefassten Systems als Funktion der großkanonischen Zustandssumme seines ungestörten Pendantes und des Störoperators gesucht. Später kann der Störterm auf die beschriebene Symmetriebrechung spezialisiert und die Zustandssumme mithilfe des verallgemeinerten Wickschen Theorems in eine passende Form gebracht werden. Dies führt schließlich auf die Freie Energie als Funktion der Stromfelder, oder nach Legendre Transformation auf die effektive Wirkung.

Die Formulierung des Problems erfolgt im Diracschen Wechselwirkungsbild unter Verwendung des Feynmanschen Tricks der imaginären Zeit. Hierdurch wird eine Ökonomisierung der notwendigen Störreihenentwicklung erzielt. Im Dirac-Bild enthält nämlich der Zeitentwicklungsoperator den gesamten Einfluss der Störung und durch Verwendung imaginärer Zeiten $\tau = it$ gewinnen der Boltzmann-Faktor $e^{-\beta H_0}$ des ungestörten Systems und der Schrödingerzeitentwicklungsoperator $e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t}$ desselben formale Äquivalenz. Durch Kombination dieser beiden Ideen gelingt es schließlich Zeitentwicklungsoperator und Zustands-summe explizit durch den Störoperator auszudrücken. Es kann dann die Zeitentwicklung des Störoperators und die Bildung des Erwartungswertes im ungestörten System, also insbesondere im thermodynamischen Gleichgewicht durchgeführt werden.

B.1 Dirac-Imaginärzeitentwicklungsoperator

Es bezeichne \hat{H}_0 den nicht explizit zeitabhängigen Hamiltonoperator eines als ungestört aufgefassten Systems im Schrödingerbild und $\hat{H}_\tau = \hat{H}_0 + \hat{V}_\tau$ den Hamiltonoperator zur Zeit $t = -i\tau$. Der Zeitentwicklungsoperator des Dirac-Bildes in Imaginärzeit $\tau = it$ ist analog wie in Realzeit definiert:

$$U^D(\tau, \tau') := e^{\frac{1}{\hbar} \hat{H}_0 \tau} e^{-\frac{1}{\hbar} \hat{H}(\tau - \tau')} e^{-\frac{1}{\hbar} \hat{H}_0 \tau'} \quad (\text{B.1})$$

Es ist zu beachten, dass dieser Operator zwar offensichtlich die üblichen Eigenschaft der Transitivität, d.h. $\hat{U}^D(\tau_1, \tau_2) \hat{U}^D(\tau_2, \tau_3) = \hat{U}^D(\tau_1, \tau_3)$ sowie $\hat{U}^D(\tau, \tau) = \hat{1}$ besitzt, aber im Unterschied zum Zeitentwicklungsoperator in Realzeit nicht unitär ist.

Aus (B.1) folgt zusammen mit der Tatsache, dass die partielle Ableitung die explizite Zeitabhängigkeit nicht betrifft:

$$-\hbar \frac{\delta}{\delta \tau} \hat{U}^D(\tau, \tau') = \hat{V}_\tau^D(\tau) \hat{U}^D(\tau, \tau') \quad (\text{B.2})$$

Darin bezeichnet $\hat{V}_\tau^D(\tau) = e^{-\frac{1}{\hbar} \hat{H}_0 \tau} \hat{V}_\tau e^{\frac{1}{\hbar} \hat{H}_0 \tau}$ den Dirac-Operator zum i.A. explizit zeitabhängigen Operator \hat{V}_τ . Sofern nichts anderes gesagt wird, ist im Folgenden automatisch von explizit zeitabhängigen Operatoren auszugehen und die unteren Indizes werden unterdrückt. Wie in Realzeit ist die Lösung dieser Gleichung eine Von-Neumann-Reihe. Dies ist wie folgt einzusehen: Mit $\hat{U}^D(\tau, \tau) = 1$ gilt nach Integration:

$$\hbar \hat{U}^D(\tau, \tau_0) = 1 - \int_{\tau_0}^{\tau} d\tau_1 \hat{V}^D(\tau_1) \hat{U}^D(\tau_1, \tau_0) \quad (\text{B.3})$$

Iteration dieser Gleichung ergibt

$$\hbar \hat{U}^D(\tau, \tau_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \hat{U}^{D(n)}(\tau, \tau_0) \quad (\text{B.4})$$

wobei $\hat{U}^{D(n)}(\tau, \tau_0)$ mit $\tau > \tau_1 > \dots > \tau_n > \tau_0$ durch folgenden Ausdruck gegeben ist:

$$\hat{U}^{D(n)}(\tau, \tau_0) = \left(\frac{-1}{\hbar}\right)^n \int_{\tau_0}^{\tau} d\tau_1 \int_{\tau_0}^{\tau_1} d\tau_2 \dots \int_{\tau_0}^{\tau_{n-1}} d\tau_n \hat{H}_{\tau_1} \hat{H}_{\tau_2} \dots \hat{H}_{\tau_n} \quad (\text{B.5})$$

Aus

$$\begin{aligned} \int_{\tau_0}^{\tau} d\tau_1 \int_{\tau_0}^{\tau_1} d\tau_2 \hat{V}^D(\tau_1) \hat{V}^D(\tau_2) &= \int_{\tau_0}^{\tau} d\tau_2 \int_{\tau_2}^{\tau} d\tau_1 \hat{V}^D(\tau_1) \hat{V}^D(\tau_2) \\ &= \int_{\tau_0}^{\tau} d\tau_1 \int_{\tau_1}^{\tau} d\tau_2 \hat{V}^D(\tau_2) \hat{V}^D(\tau_1) \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

folgt:

$$\begin{aligned} &\int_{\tau_0}^{\tau} d\tau_1 \int_{\tau_0}^{\tau_1} d\tau_2 \hat{V}^D(\tau_1) \hat{V}^D(\tau_2) \\ &= \frac{1}{2} \int_{\tau_0}^{\tau} d\tau_1 \int_{\tau_0}^{\tau_1} d\tau_2 \left[\Theta(\tau_1 - \tau_2) (\hat{V}^D(\tau_1) \hat{V}^D(\tau_2)) + \Theta(\tau_2 - \tau_1) (\hat{V}^D(\tau_2) - \hat{V}^D(\tau_1)) \right] \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

$$= \frac{1}{2!} \int_{\tau_0}^{\tau} \int_{\tau_0}^{\tau} \hat{T}_D \left(\hat{V}^D(\tau_1) \hat{V}^D(\tau_2) \right) \quad (\text{B.8})$$

Im letzten Schritt wurde der Dysonsche Zeitordnungsoperator eingeführt, der durch

$$\hat{T}_D(\hat{A}(t) \hat{B}(t')) := \Theta(t - t') \hat{A}(t) \hat{B}(t') + \Theta(t' - t) \hat{B}(t') \hat{A}(t) \quad (\text{B.9})$$

definiert ist. Wie der Wick'sche Zeitordnungsoperator \hat{T}_η sortiert er das nachfolgende Produkt aus Operatoren nach der Größe ihres Zeitargumentes, allerdings ohne Vorzeichenwechsel für Fermionen. Die Überlegung kann sofort verallgemeinert werden, weil induktiv auf der linken Seite immer noch einen Störoperator $\hat{V}^D(\tau_i)$ hinzugefügt werden kann, für den dieselbe Überlegung gilt:

$$\hat{U}^{D(n)}(\tau, \tau_0) = \left(\frac{-1}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!} \int_{\tau_0}^{\tau} d\tau_1 \dots \int_{\tau_0}^{\tau} d\tau_n \hat{T}_D \left(\hat{V}^D(\tau_1) \hat{V}^D(\tau_2) \dots \hat{V}^D(\tau_n) \right) \quad (\text{B.10})$$

Für Bosonensysteme sind \hat{T}_τ und \hat{T}_η identisch. Falls $\hat{V}^D(\tau)$ ausschließlich Summanden gerader Anzahl von Konstruktionsoperatoren enthält, kann auch für Fermionensysteme \hat{T}_D durch \hat{T}_η ersetzt werden. Dann heben sich alle Vorzeichen die \hat{T}_τ erzeugt auf. Für solche Systeme gilt:

$$\begin{aligned}
 \hat{U}^D(\tau, \tau_0) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-1}{\hbar} \right)^n \int_{\tau_0}^{\tau} d\tau_1 \dots \int_{\tau_0}^{\tau} d\tau_n \hat{T}_{\tau} \left(\hat{V}^D(\tau_1) \dots \hat{V}^D(\tau_n) \right) \\
 &= \hat{T}_{\tau} \left(\exp \left[\frac{-1}{\hbar} \int_{\tau_0}^{\tau} d\tau' \hat{V}^D(\tau') \right] \right)
 \end{aligned} \tag{B.11}$$

Damit ist eine explizite Darstellung des Imaginärzeitentwicklungsoperators des Dirac-Bildes durch den Störoperator gefunden.

B.2 Großkanonische Zustandssumme

Es wird jetzt die großkanonische Zustandssumme Z_G durch die des ungestörten Systems $Z_G^{(0)}$ und den Störoperator $\hat{V}^D(\tau)$ ausgedrückt.

Wahl von $\tau' = 0$ in (B.1) liefert:

$$e^{-\frac{1}{\hbar} \hat{H} \tau} = e^{-\frac{1}{\hbar} \hat{H}_0 \tau} U^D(\tau, 0) \tag{B.12}$$

Speziell für $\tau = \hbar\beta$ folgt dann:

$$e^{-\beta \hat{H}} = e^{-\beta \hat{H}_0} \hat{U}^D(\hbar\beta, 0) \tag{B.13}$$

und weiter:

$$Z_G = \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{H}} \right\} = \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{H}_0} \hat{U}^D(\hbar\beta, 0) \right\} = Z_G^{(0)} \left\langle \hat{U}^D(\hbar\beta, 0) \right\rangle \tag{B.14}$$

Mit (B.11) folgt die großkanonische Zustandssumme in der gewünschten Form:

$$Z_G = Z_G^{(0)} \left\langle \hat{T}_{\tau} \left(\exp \left[\frac{-1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} \hat{V}^D(\tau) d\tau \right] \right) \right\rangle \tag{B.15}$$

Dieser Ausdruck gibt den allgemeinen Zusammenhang der großkanonischen Zustandssumme eines Systems mit Hamiltonoperator $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ und der großkanonischen Zustandssumme eines (ungestörten) Systems mit Hamiltonoperator \hat{H}_0 an. Interessiert etwa nur die Gleichgewichts-Thermodynamik eines komplizierten Systems, so kann von der Zustandssumme des idealen Systems ausgegangen werden und der Wechselwirkungsoperator als Störung \hat{V} aufgefasst und künstlich zeitabhängig gemacht werden. Es wird (B.15) jetzt speziell für den explizit zeitabhängigen Störoperator

$$\hat{V} = \sum_{\alpha} \hat{a}_{\alpha} j_{\alpha}^*(\tau) + \hat{a}_{\alpha}^+ j_{\alpha}(\tau) \tag{B.16}$$

ausgewertet. Der entsprechende Dirac Operator lautet:

$$\hat{V}^D(\tau) = e^{\frac{1}{\hbar}\hat{H}_0\tau}\hat{V}e^{-\frac{1}{\hbar}\hat{H}_0\tau} = \sum_{\alpha} \hat{a}_{\alpha}^D(\tau)j_{\alpha}^*(\tau) + \hat{a}_{\alpha}^{+D}(\tau)j_{\alpha}(\tau) \quad (\text{B.17})$$

Einsetzen desselben in (B.15) ergibt:

$$Z_G[j_{\alpha}(\tau), j_{\alpha}^*(\tau)] = Z_G^{(0)} \left\langle \hat{T}_{\tau} \left(\exp \frac{-1}{\hbar} \left[\int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau \hat{a}_{\alpha}^D(\tau)j_{\alpha}^*(\tau) + \hat{a}_{\alpha}^{+D}(\tau)j_{\alpha}(\tau) \right] \right) \right\rangle \quad (\text{B.18})$$

Es ist unpraktisch eine unendliche Reihe zeitordnen zu müssen. Mithilfe des Wickschen Theorems kann dieser Umstand behoben werden: Zunächst sei die Exponentialreihe in (B.18) betrachtet:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-1}{\hbar} \right)^n \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \dots \int_0^{\hbar\beta} d\tau_n \left\langle \hat{T}_{\tau} (\hat{V}^D(\tau_1) \dots \hat{V}^D(\tau_n)) \right\rangle \quad (\text{B.19})$$

Da der thermodynamische Gleichgewichtserwartungswert jedes Produktes aus einer ungeraden Gesamtzahl von Konstruktionsoperatoren verschwindet, bleiben nur diejenigen Summanden mit gerader Anzahl Störoperatoren $\hat{V}^D(\tau_i)$ bestehen, so dass sich (B.19) auf folgenden Term reduziert.

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n)!} \left(\frac{-1}{\hbar} \right)^{2n} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \dots \int_0^{\hbar\beta} d\tau_{2n} \left\langle T_{\tau} \left(\hat{V}^D(\tau_1) \dots \hat{V}^D(\tau_{2n}) \right) \right\rangle \quad (\text{B.20})$$

Mithilfe des Wickschen Theorems wird jetzt das zeitgeordnete Produkt aus $2n$ gleichen Operatoren zerlegt:

$$\begin{aligned} \left\langle \hat{T}_{\tau} \left(\hat{V}^D(\tau_1) \dots \hat{V}^D(\tau_{2n}) \right) \right\rangle &= \overbrace{\hat{V}^D(\tau_1)\hat{V}^D(\tau_2)\hat{V}^D(\tau_3)\hat{V}^D(\tau_4)\dots\hat{V}^D(\tau_{2n-1})\hat{V}^D(\tau_{2n})} \\ &+ \overbrace{\hat{V}^D(\tau_1)\hat{V}^D(\tau_2)\hat{V}^D(\tau_3)\dots\hat{V}^D(\tau_{2n-2})\hat{V}^D(\tau_{2n-1})\hat{V}^D(\tau_{2n})} \\ &+ \dots \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

Wobei die Kontraktionen durch $\overbrace{\hat{V}^D(\tau_i)\hat{V}^D(\tau_j)} := \left\langle \hat{T}_{\tau} \left(\hat{V}^D(\tau_i)\hat{V}^D(\tau_j) \right) \right\rangle$ gegeben sind.

Da alle kontraktierten Operatoren gleich sind und über dasselbe Imaginärzeitintervall integriert werden, sind alle Summanden der rechten Seite von (B.21) gleich. Jeder Summand lautet deshalb einfach:

$$\left\langle \hat{T}_{\tau} \left(\hat{V}^D(\tau_1)\hat{V}^D(\tau_2) \right) \right\rangle^n \quad (\text{B.22})$$

Es bleibt die Frage wieviele Summanden auf der rechten Seite von (B.21) stehen. Der erste Störoperator $\hat{V}^D(\tau_1)$ kann sich mit allen $2n - 1$ anderen Operatoren paaren. Für

den zweiten Operator bleiben alle Möglichkeiten zur Paarung, außer mit dem ersten und dessen Partner. Das sind $2n - 3$ Möglichkeiten. Für den i -ten Operator entfallen die $i - 1$ schon gepaarten Operatoren und deren Partner. Ihm bleiben $2n - 2i - 1$ Möglichkeiten. Auf der rechten Seite von (B.21) stehen also $(2n - 1)!!$ identische Summanden. Es gilt folglich:

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \dots \int_0^{\hbar\beta} d\tau_{2n} \left\langle \hat{T}_\tau \left(\hat{V}^D(\tau_1) \dots V^D(\tau_{2n}) \right) \right\rangle = \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 (2n - 1)!! \left(\left\langle \hat{T}_\tau \left(\hat{V}^D(\tau_1) \hat{V}^D(\tau_2) \right) \right\rangle \right)^n \quad (\text{B.23})$$

Durch Rückeinsetzen in (B.19) folgt mit $(2n)! = (2n)(2n - 1)(2n - 2)(2n - 3) \dots \cdot 4 \cdot 3 \cdot 2 \cdot 1 = (2n - 1)!! \cdot (2n)(2n - 2) \dots \cdot 4 \cdot 2 = (2n - 1)!! \cdot 2^n (n!)$ aus (B.18):

$$Z_G[j_\alpha(\tau)j_\alpha^*(\tau)] = Z_G^{(0)} \sum_0^\infty \frac{1}{n!} \left(\frac{1}{2\hbar^2} \right)^n \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 \left[\left\langle \hat{T}_\tau \left(\hat{V}^D(\tau_1) \hat{V}^D(\tau_2) \right) \right\rangle \right]^n \quad (\text{B.24})$$

Dieser Ausdruck besitzt noch allgemeine Gültigkeit für solche Störoperatoren, die nur aus Termen ungerader Anzahl von Konstruktionsoperatoren bestehen, weil von (B.17) nur diese Eigenschaft verwendet wurde.

Es wird jetzt auf die speziell interessierende Störung (B.17) spezialisiert. Einsetzen von (B.17) in (B.24) ergibt mit $\langle \hat{a}_\alpha \hat{a}_\alpha \rangle = 0$ für das zeitgeordnete Produkt, durch Ausnutzen der Tatsache, dass die Operatorreihenfolge im Argument von \hat{T}_τ beliebig ist:

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha_1, \alpha_2} \left\langle \hat{T}_\tau \left(\hat{a}_{\alpha_1}^D(\tau_1) j_{\alpha_1}^*(\tau_1) \hat{a}_{\alpha_2}^{+D}(\tau_2) j_{\alpha_2}(\tau_2) + \hat{a}_{\alpha_1}^{+D}(\tau_1) j_{\alpha_1}(\tau_1) \hat{a}_{\alpha_2}^D(\tau_2) j_{\alpha_2}^*(\tau_2) \right) \right\rangle \\ &= \sum_{\alpha_1, \alpha_2} 2 \cdot \left\langle \hat{T}_\tau \left(\hat{a}_{\alpha_1}^D(\tau_1) \hat{a}_{\alpha_2}^{+D}(\tau_2) \right) \right\rangle j_{\alpha_1}^*(\tau_1) j_{\alpha_2}(\tau_2) \end{aligned} \quad (\text{B.25})$$

Nach Identifikation der Einteilchen-Matsubara-Funktion (B.51)

$$G_{\alpha_1, \alpha_2}^M(\tau_1, \tau_2) = - \left\langle T_\tau \left(\hat{a}_{\alpha_1}^D(\tau_1) \hat{a}_{\alpha_2}^{+D}(\tau_2) \right) \right\rangle \quad (\text{B.26})$$

vereinfacht sich (B.24) zu:

$$\begin{aligned} Z_G[j_\alpha^*(\tau), j_\alpha(\tau)] &= Z_G^{(0)} \sum_{n=0}^\infty \frac{1}{n!} \left(\frac{1}{2\hbar^2} \right)^n \\ &\times \sum_{\alpha_1, \alpha_2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 2^n \left(-G_{\alpha_1, \alpha_2}^M(\tau_1, \tau_2) \right) j_{\alpha_1}^*(\tau_1) j_{\alpha_2}(\tau_2) \end{aligned} \quad (\text{B.27})$$

$$Z_G[j_\alpha(\tau)j_\alpha^*(\tau)] = Z_G^{(0)} \exp \left[\frac{1}{\hbar^2} \sum_{\alpha_1, \alpha_2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \left(-G_{\alpha_1, \alpha_2}^M(\tau_1, \tau_2) \right) j_{\alpha_1}^*(\tau_1) j_{\alpha_2}(\tau_2) \right] \quad (\text{B.28})$$

Für Störungen vom Typ (B.17) ist damit die Zustandssumme durch die des ungestörten Systems und eine EinteilchenMatsubara-Funktion ausgedrückt.

B.3 Effektive Wirkung

In diesem Abschnitt wird zuerst die Freie Energie eines durch (B.17) gestörten Systems durch die des Ungestörten ausgedrückt. Anschließend folgt durch Variablenwechsel per funktionaler Legendre Transformation die effektive Wirkung des Systems. Zu deren Auswertung wird der Einfachheit wegen auf ideale Systeme spezialisiert, weil in diesen die Matsubara-Funktion und damit auch deren Inverse durch eine einfache aus den allgemeinen Formeln in Abschnitt 2.3.1 resultierende Form haben.

Mit $F_G = -\frac{1}{\beta} \ln Z_G$ folgt aus (B.28) unmittelbar die großkanonische Freie Energie des gestörten Systems:

$$F_G[j_\alpha^*(\tau), j_\alpha(\tau)] = \frac{-1}{\hbar^2 \beta} \sum_{\alpha_1, \alpha_2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \left(-G_{\alpha_1, \alpha_2}^M(\tau_1, \tau_2) \right) j_{\alpha_1}(\tau_1) j_{\alpha_2}^*(\tau_2) - \frac{1}{\beta} \ln(Z_G^{(0)}) \quad (\text{B.29})$$

Die effektive Wirkung Γ ist als funktionale Legendre Transformierte der Freien Energie zum durch (B.16) Symmetriegebrochenen Hamiltonoperator in den Stromfeldern definiert.

$$\begin{aligned} \Gamma[\Psi, \Psi^*] &:= F_G[j^*(\Psi^*, \Psi), j(\Psi^*, \Psi)] \\ &- \sum_{\alpha} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \frac{\delta F_G[j_\alpha^*(\tau), j_\alpha(\tau)]}{\delta j_\alpha(\tau)} j^*(\Psi_\alpha^*(\tau), \Psi_\alpha(\tau)) \\ &- \sum_{\alpha} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \frac{\delta F_G[j_\alpha^*(\tau), j_\alpha(\tau)]}{\delta j_\alpha^*(\tau)} j(\Psi_\alpha^*(\tau), \Psi_\alpha(\tau)) \end{aligned} \quad (\text{B.30})$$

Darin bezeichnen

$$\Psi_\alpha(\tau) := -\hbar\beta \frac{\delta F_G[j_\alpha^*(\tau), j_\alpha(\tau)]}{\delta j_\alpha(\tau)} \langle \hat{a}_\alpha(\tau) \rangle \quad (\text{B.31})$$

$$\Psi_\alpha^*(\tau) := -\hbar\beta \frac{\delta F_G[j_\alpha^*(\tau), j_\alpha(\tau)]}{\delta j_\alpha(\tau)} = \langle \hat{a}_\alpha^+(\tau) \rangle \quad (\text{B.32})$$

die sogenannten Background Felder. $\Psi_\sigma := \Psi_{\mathbf{k}=0,\sigma}$ ist der Ordnungsparameter für den Übergang von der gewöhnlichen flüssigen Phase zur superfluiden Phase für Teilchen im Spinzustand $|\sigma\rangle$. Das Betragsquadrat $|\Psi_\sigma|^2 = \Psi_\sigma \Psi_\sigma^*$ ist dabei mit der Bose-Einstein-Kondensatdichte $n_{0,\sigma}$ zu identifizieren. Mit

$$\frac{\delta}{\delta j_\alpha^*(\tau)} \left[\sum_{\alpha_1} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 G_{\alpha_1, \alpha_2}^M(\tau_1, \tau_2) j_{\alpha_1}^*(\tau_1) j_{\alpha_2}(\tau_2) \right] = G_{\alpha, \alpha_2}^M(\tau, \tau_2) j_{\alpha_2}(\tau_2) \quad (\text{B.33})$$

folgt aus (B.29):

$$\Psi_\alpha(\tau) = \frac{1}{\hbar} \sum_{\alpha_1} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 [-G_{\alpha, \alpha_1}^M(\tau, \tau_1)] j_{\alpha_1}(\tau_1) \quad (\text{B.34})$$

$$\Psi_\alpha^*(\tau) = \frac{1}{\hbar} \sum_{\alpha_1} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 j_{\alpha_1}^*(\tau_1) (-G_{\alpha_1, \alpha}^M(\tau_1, \tau)) \quad (\text{B.35})$$

Ferner werden $j(\Psi_\alpha^*(\tau), \Psi_\alpha(\tau))$ und $j^*(\Psi^*, \Psi)$ in (B.30) benötigt. Mit (B.72) folgt aus (B.34) nach Multiplikation von $\Psi_{\alpha_2}(\tau_2)$ mit der in (B.73) definierten Größe $\hbar G_{\alpha, \alpha_2}^{-1}(\tau, \tau_2)$ von links und anschließender Integration über τ_2 sowie Bildung des Summenintegrals über α_2 :

$$\begin{aligned} \hbar \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \sum_{\alpha_1} G_{\alpha, \alpha_1}^{-1}(\tau, \tau_1) \Psi_{\alpha_1}(\tau_1) &= \sum_{\alpha_1} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 j_{\alpha_1}(\tau_1) \delta_{\alpha, \alpha_1} \delta(\tau - \tau_1) \\ &= j_\alpha(\tau) = j\left(\Psi_\alpha(\tau), \Psi_\alpha^*(\tau)\right) \end{aligned} \quad (\text{B.36})$$

Darin ist α wieder ein vollständiger Satz aus Quantenzahlen des Einteilchenhilbertraums und $h_{\alpha_i, \alpha_j} = \langle \alpha_i | \hat{h} | \alpha_j \rangle$ das mit den entsprechenden Eigenzuständen gebildete Matrixelement des Einteilchenhamiltonoperators.

Analog folgt aus (B.35)

$$\hbar \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \sum_{\alpha_1} \Psi_{\alpha_1}^*(\tau_1) G_{\alpha_1, \alpha}^{-1}(\tau_1, \tau) = j_\alpha^*(\tau) = j^*\left(\Psi_\alpha(\tau), \Psi_\alpha^*(\tau)\right) \quad (\text{B.37})$$

Einsetzen von (B.29),(B.36) und (B.37) in (B.30) ergibt:

$$\begin{aligned}
 \Gamma[\Psi^*, \Psi] &= \frac{1}{\beta} \hbar^2 \int \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_3 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_4 G_{\alpha_1, \alpha_2}^M(\tau_1, \tau_2) G_{\alpha_2, \alpha_4}^{-1}(\tau_2, \tau_4) \\
 &\times \Psi_{\alpha_4}(\tau_4) \Psi_{\alpha_3}^*(\tau_3) G_{\alpha_3, \alpha_1}^{-1}(\tau_3, \tau_1) \\
 &+ \frac{1}{\beta} \int \sum_{\alpha_1, \alpha_2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \Psi_{\alpha_2}(\tau_2) \Psi_{\alpha_1}^*(\tau_1) G_{\alpha_1, \alpha_2}^{-1}(\tau_1, \tau_2) \\
 &+ \frac{1}{\beta} \int \sum_{\alpha_1, \alpha_2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \Psi_{\alpha_2}^*(\tau_2) G_{\alpha_2, \alpha_1}^{-1}(\tau_2, \tau_1) \Psi_{\alpha_1}(\tau_1) - \frac{1}{\beta} \ln(Z_G^0) \quad (B.38)
 \end{aligned}$$

Nach Anwendung von auf den ersten Summanden dieses Ausdrucks, ist dieser bis auf das Vorzeichen identisch mit dem zweiten Summanden. Das Ergebnis für die effektive Wirkung lautet damit:

$$\Gamma[\Psi, \Psi^*] = \frac{1}{\beta} \left[\int \sum_{\alpha_1, \alpha_2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \Psi_{\alpha_2}^*(\tau_2) G_{\alpha_2, \alpha_1}^{-1}(\tau_2, \tau_1) \Psi_{\alpha_1}(\tau_1) \right] - \frac{1}{\beta} \ln(Z_G^{(0)}) \quad (B.39)$$

B.4 Gross-Pitaevskii-Gleichung

Die Bewegungsgleichung des Ordnungsparameters folgt durch Extremalisierung der effektiven Wirkung nach den Ensemblemittelwerten der Vernichter :

$$\frac{\delta \Gamma[\Psi^*, \Psi]}{\delta \Psi_{\alpha}^*(\tau)} = 0 \quad (B.40)$$

Nach Ausführen der Funktionalableitung und Summenintegration über die Deltafunktionen in (B.39) folgt:

$$\frac{\hbar}{\beta} \int \sum_{\alpha_1} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 G_{\alpha, \alpha_1}^{-1}(\tau, \tau_1) \Psi_{\alpha_1}(\tau_1) = 0 \quad (B.41)$$

Nach Einsetzen von (B.73), Ausführung von Integral und Summenintegral sowie Multiplikation mit β resultiert:

$$\left(\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} + h(\alpha) - \mu \right) \Psi_{\alpha}(\tau) = 0 \quad (B.42)$$

Sei $\{\phi_i(\alpha)\}$ eine vollständige Orthonormalbasis des Einteilchenhilbertraumes aus Eigenzuständen zu den Einteilchenenergieeigenwerten ε_i und sei ferner \hat{a}_i der Vernichter eines

Quants im Einteilchenenergieniveau ε_i . Dann kann der Operator $\hat{a}_\alpha(\tau)$ spektral in diese Basis zerlegt werden:

$$\hat{a}_\alpha(\tau) = \hat{a}_{0\sigma}\phi_0(\alpha, \tau) + \sum_{i=1} \hat{a}_{i\sigma}\phi_i(\alpha, \tau) \quad (\text{B.43})$$

Mit $\Psi_{0\alpha}(\tau) := \hat{a}_{0\sigma}\phi_0(\alpha, \tau)$ folgt aus (B.42), unter Ausnutzung der Orthogonalität der gewählten Basiszustände speziell:

$$\left(\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} + h(\alpha) - \mu \right) \Psi_{0\alpha}(\tau) = 0 \quad (\text{B.44})$$

Wegen der Translationsinvarianz in Imaginärzeit muss $\Psi_{0\alpha}(\tau) \rightarrow \Psi_{0\alpha}$ zeitunabhängig sein. Damit folgt aus (B.44) die stationäre Gross-Pitaevskii-Gleichung:

$$\left(\hat{h}(\alpha) - \mu \right) \Psi_{0\alpha} = 0 \quad (\text{B.45})$$

Der stationären Gross-Pitaevskii-Gleichung (B.45) entspricht die zeitabhängige Gross-Pitaevskii-Gleichung:

$$\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \hat{h}(\alpha) \right) \Psi_{0\alpha}(t) = 0 \quad (\text{B.46})$$

Der Übergang vollzieht sich mittels $\Psi_{0\alpha}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\mu t} \Psi_{0\alpha}$. Es wird jetzt auf die Orts-Spin-Basis $\alpha \rightarrow (\mathbf{x}, \sigma)$ und den Einteilchenhamiltonoperator $\hat{h}(\mathbf{x}\sigma) = \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} - B_z \hat{m}_z + U(\mathbf{x})$ spezialisiert. Daraus folgt sogleich die zeitunabhängige Gross-Pitaevskii-Gleichung in der üblichen Form:

$$\left(\frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} - B_z \hat{m}_z - \mu + U(\mathbf{x}) \right) \Psi_{0\mathbf{x}\sigma} = 0 \quad (\text{B.47})$$

Mit der im thermodynamischen Limes exakten Bogogliubov-Ersetzung $\hat{a}_{0\sigma} \rightarrow \sqrt{n_{0\sigma}}$ folgt

$$\left(\frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} - B_z \hat{m}_z - \mu + U(\mathbf{x}) \right) \sqrt{n_{0\sigma}} \phi_0(\mathbf{r}\sigma) = 0 \quad (\text{B.48})$$

Nach Definition erfüllt $\phi_0(\mathbf{r}\sigma)$ die Einteilchenschrodingergleichung

$$\left(\frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U(\mathbf{x}) - B_z \hat{m}_z \right) \phi_0(\mathbf{r}\sigma) = E_{0\sigma} \phi_0(\mathbf{r}\sigma) \quad (\text{B.49})$$

Darin bezeichnet E_0 die Grundzustandsenergie eines Quants im Potential $U(\mathbf{x})$, so dass mit (3.15) $E_{0\sigma} = E_0 - \alpha\sigma$ gilt. Damit kann (B.48) schließlich in folgender Form geschrieben werden:

$$(E_0 - \alpha\sigma - \mu)\Psi_{0\mathbf{x}\sigma} = 0 \quad (\text{B.50})$$

Die Gleichungen (B.46) heißen zeitabhängige Gross-Pitaevskii-Gleichungen und beschreiben die Dynamik des Ordnungsparameters $\Psi_{0\alpha}$ bei beliebiger Temperatur. In idealen Systemen, wie sie hier vorliegen, ist es möglich, den Kondensatanteil und den thermischen Anteil unabhängig voneinander zu beschreiben, so dass die Gross-Pitaevskii-Gleichungen dann für den Kondensatanteil exakt gelten. Da in idealen Systemen bei $T = 0$ das ganze System als BEK vorliegt, beschreiben die zeitabhängigen Gross-Pitaevskii Gleichungen dann sogar dessen Dynamik vollständig. Häufig werden BEKe in verdünnten Quantengasen allein durch die G.P. Gleichung beschrieben. Dies ist dann als Mean-Field Beschreibung zu verstehen, die jedoch aufgrund der hohen Kondensatdichte von üblicherweise etwa 90% häufig zu guten Übereinstimmung mit den experimentellen Befunden führt. In Kapitel 4 wurde gezeigt, dass bei hinreichend tiefer Temperatur auch im thermischen Anteil ein kohärenzähnlicher Zustand besteht, was den Erfolg reiner Gross-Pitaevskii-Beschreibungen zusätzlich plausibilisiert. Die Beschreibung eines Vielteilchensystem mithilfe der Gross-Pitaevskii-Gleichung hat den großen Vorteil, dass sich ,auch bei Berücksichtigung von Mehrteilchenwechselwirkungen, das Vielteilchenproblem auf ein effektives Einteilchenproblem reduziert. A. Griffin et al. sprechen allerdings von einer ganzen Klasse neuer Phänomene, durch die Berücksichtigung von Temperatureffekten [4].

B.5 Matsubara-Funktion

Die Matsubara-Funktion übernimmt die Rolle der kausalen Green-Funktion bei endlichen Temperaturen. Aufgrund der Zeitordnung ist die Störreihenentwicklung einfacher als für avancierte und retardierte Green-Funktion und es kann ein verallgemeinertes Wickssches Theorem formuliert werden [54]. Die folgenden Ausführungen erfolgen in Anlehnung an [54, 66, 64].

Die Matsubara-Funktion ist wie folgt definiert:

$$G_{AB}^M(\tau, \tau') := - \langle \hat{T}_\tau(\hat{A}^D(\tau)\hat{B}^D(\tau')) \rangle \quad (\text{B.51})$$

Dabei ist

$$\theta(\tau) := \begin{cases} 1 & ; \tau > 0 \\ 0 & ; \tau < 0 \end{cases} \quad (\text{B.52})$$

die Stufenfunktion für imaginäre Zeiten und der Zeitordnungsoperator \hat{T}_τ für imaginäre Zeiten durch folgende Gleichung definiert:

$$T_\tau(\hat{A}(\tau)\hat{B}(\tau')) = \theta(\tau - \tau')\hat{A}(\tau)\hat{B}(\tau') + \eta^p\theta(\tau' - \tau)\hat{B}(\tau')\hat{A}(\tau) \quad (\text{B.53})$$

Dabei ist p die Zahl der Permutationen die nötig ist um die Operatoren des zweiten Summanden in dieselbe Reihenfolge wie im ersten Summanden zu bringen. Die übrigen Definitionen entsprechen den in Abschnitt (A.2) gegebenen, wobei statt $\hat{O}(\tau = 0)$ abkürzend \hat{O} geschrieben wird. Matsubara-Funktionen hängen wie die Green-Funktionen nur von der Zeitdifferenz ab, was sich analog wie in Abschnitt A.3.1 einsehen lässt. Es gilt:

$$G_{AB}^M(\tau, \tau') = G_{AB}^M(\tau - \tau') \quad (\text{B.54})$$

Wichtig ist die Periodizität der Matsubara-Funktion, weil sie die Entwicklung derselben in eine Fourier-Reihe gestattet. Für $\hbar\beta > \tau' - \tau > 0$ gilt:

$$G_{AB}^M(\tau - \tau' - \hbar\beta) = \eta G_{AB}^M(\tau - \tau') \quad (\text{B.55})$$

Dies ist wie folgt einzusehen: Für $\hbar\beta > \tau - \tau' + n\hbar\beta > 0$ belässt der Zeitordnungsoperator die Reihenfolge der Operatoren und es gilt nach (B.51) und (B.54) nach Verwendung der zyklischen Invarianz der Spur.

$$\begin{aligned} G_{AB}^M(\tau - \tau' + n\hbar\beta) &= \frac{-1}{Z_G} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta\hat{H}} \hat{A}^D(\tau - \tau' + n\hbar\beta) \hat{B} \right\} \\ &= \frac{-1}{Z_G} \text{Tr} \left\{ e^{\frac{1}{\hbar}\hat{H}(\tau - \tau' + (n-1)\hbar\beta)} \hat{A} e^{-\frac{1}{\hbar}\hat{H}(\tau - \tau' + (n-1)\hbar\beta)} e^{-\beta\hat{H}} \hat{B} \right\} \\ &= \frac{-1}{Z_G} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta\hat{H}} \hat{B} \hat{A}(\tau - \tau' + (n-1)\hbar\beta) \right\} \end{aligned} \quad (\text{B.56})$$

Nach Voraussetzung gilt $\tau - \tau' + (n-1)\hbar\beta < 0$, womit folgt:

$$G_{AB}^M(\tau - \tau' + n\hbar\beta) = \frac{-\eta}{Z_G} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta\hat{H}} \hat{T}_\tau \left(\hat{A}^D(\tau - \tau' + (n-1)\hbar\beta) \hat{B} \right) \right\} \quad (\text{B.57})$$

Insbesondere gilt für $n = 1$ und $\hbar\beta > \tau' - \tau > 0$:

$$G_{AB}^M(\tau - \tau' + \hbar\beta) = \eta G_{AB}^M(\tau - \tau') \quad (\text{B.58})$$

Die Matsubara-Funktion ist demnach periodisch in τ mit einem Periodizitätsintervall von $\hbar\beta$ für Bosonen und $2\hbar\beta$ für Fermionen.

Infolge dieser Periodizität ist eine Fourierreihenentwicklung der Matsubara-Funktion möglich. Um die Betrachtungen allgemein zu halten wird bezüglich der Periode 2π entwickelt, die für Bosonen und Fermionen gilt:

$$\begin{aligned} G^M(\tau) &= \frac{1}{2} a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \left[a_n \cos\left(\frac{n\pi}{\hbar\beta}\tau\right) + b_n \sin\left(\frac{n\pi}{\hbar\beta}\tau\right) \right] \\ a_n &= \frac{1}{\hbar\beta} \int_{-\hbar\beta}^{\hbar\beta} d\tau G^M(\tau) \cos\left(\frac{n\pi}{\hbar\beta}\tau\right) \\ b_n &= \frac{1}{\hbar\beta} \int_{-\hbar\beta}^{\hbar\beta} d\tau G^M(\tau) \sin\left(\frac{n\pi}{\hbar\beta}\tau\right) \end{aligned} \quad (\text{B.59})$$

Mit $E'_n := \frac{n\pi}{\beta}$ und $G^M(E'_n) := \frac{\hbar\beta}{2}(a_n + ib_n)$ gilt weiter:

$$G_{AB}^M(\tau) = \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}E'_n\tau} G_{AB}^M(E'_n) \quad (\text{B.60})$$

$$G_{AB}^M(E'_n) = \frac{1}{2} \int_{-\hbar\beta}^{\hbar\beta} d\tau G_{AB}^M(\tau) e^{\frac{i}{\hbar}E'_n\tau} \quad (\text{B.61})$$

Nach Aufspalten von (B.60) in zwei Integrale $\int_0^{\hbar\beta} + \int_{-\hbar\beta}^0$ und Sustitution von τ durch $\tau' := \tau - \hbar\beta$ im zweiten Summanden, gilt:

$$G_{AB}^M(E'_n) = \frac{1}{2} \int_{-\hbar\beta}^0 d\tau G_{AB}^M(\tau) e^{\frac{i}{\hbar}E'_n\tau} + \frac{1}{2} \int_{-\hbar\beta}^0 d\tau G_{AB}^M(\tau - \hbar\beta) e^{\frac{i}{\hbar}E'_n\tau} e^{-\beta i E'_n} \quad (\text{B.62})$$

Damit gilt, nach Anwendung von (B.55) auf den zweiten Summanden und nochmals zur Verschiebung des Integrationsintervalls, der folgende Ausdruck:

$$G_{AB}^M(E'_n) = \frac{1 + \eta e^{-i\beta E'_n}}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau G_{AB}^M(\tau) e^{\frac{i}{\hbar}E'_n\tau} \quad (\text{B.63})$$

Mit

$$E_n := \begin{cases} \frac{2\pi n}{\beta} & \text{Bosonen} \\ \frac{(2n+1)\pi}{\beta} & \text{Fermionen} \end{cases} \quad (\text{B.64})$$

reduziert sich der Vorfaktor auf 1 und das Fourier Integral lautet:

$$G_{AB}^M(E_n) = \int_0^{\hbar\beta} d\tau G_{AB}^M(\tau) e^{\frac{i}{\hbar}E_n\tau} \quad (\text{B.65})$$

Mittels (B.65) lässt sich ein Zusammenhang mit der Spektralfunktion gewinnen, was mit den Ausdrücken des Abschnittes 2.3.1 auf die allgemeine Form der Ein- (und Zweiteilchen) Matsubara-Funktionen idealer Systeme führt: Es gilt

$$\begin{aligned} Z_G \langle \hat{A}^D(\tau) \hat{B} \rangle &= \text{Tr} \{ e^{-\beta \hat{H}} \hat{A}^D(\tau) \hat{B} \} = \sum_n \langle E_n | e^{-\beta \hat{H}} \hat{A}^D(\tau) \hat{B} | E_n \rangle \\ &= \sum_{m,n} \langle E_n | \hat{A} | E_m \rangle \langle E_m | \hat{B} | E_n \rangle e^{-\beta E_n} e^{\frac{\tau}{\hbar}(E_n - E_m)} \end{aligned} \quad (\text{B.66})$$

Der Vergleich mit (A.15) liefert:

$$\langle \hat{A}^D(\tau) \hat{B} \rangle = \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{G_{AB}''(E) e^{\frac{-1}{\hbar}E\tau}}{1 - \eta e^{-\beta E}} \quad (\text{B.67})$$

Da im Integrationsintervall in (B.65) $\tau \geq 0$ ist, bleibt nach Einsetzen der Definition (B.51):

$$G_{AB}^M(E_n) = - \int_0^{\hbar\beta} d\tau e^{\frac{i}{\hbar} E_n \tau} \langle \hat{A}^D(\tau) \hat{B} \rangle \quad (\text{B.68})$$

Mit (B.68), (B.67), sowie

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau e^{\frac{\tau}{\hbar}(iE_n - E)} = \frac{\hbar}{iE_n - E} (e^{iE_n - E} - 1) = \frac{\hbar(\eta e^{-\beta E} - 1)}{iE_n - E} \quad (\text{B.69})$$

resultiert nach Ausführen des τ -Integrals:

$$G_{AB}^M(E_n) = \int_{-\infty}^{\infty} dE' \frac{S_{AB}(E')}{iE_n - E'} \quad (\text{B.70})$$

Durch Einsetzen von (2.34) in (B.70) folgt die Einteilchen Matsubara-Funktion für ideale Systeme:

$$G_{\alpha, \alpha_1}^M(E_n) = \frac{\hbar \delta_{\alpha \alpha_1}}{iE_n - (\varepsilon_\alpha - \mu)} \quad (\text{B.71})$$

Schließlich kann die bereits zur Berechnung der effektiven Wirkung benötigte Relation

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \sum_{\alpha_2} G_{\alpha, \alpha_2}^{-1}(\tau, \tau_2) G_{\alpha_2, \alpha_1}^M(\tau_2, \tau_1) = -\delta_{\alpha, \alpha_1} \delta(\tau - \tau_1) \quad \forall \tau, \tau' \in (0, \hbar\beta) \quad (\text{B.72})$$

zwischen $G_{\alpha_j \alpha_k}^M(\tau_j, \tau_k)$ und

$$G_{\alpha_i, \alpha_j}^{-1} := \frac{\delta_{\alpha_i, \alpha_j}}{\hbar} \left(\hbar \frac{\partial}{\partial \tau_j} + H(\alpha_j) - \mu \right) \delta(\tau_i - \tau_j) \quad (\text{B.73})$$

bewiesen werden. Einsetzen von (B.71) mit (B.54) in (B.60) führt auf:

$$G_{\alpha_2, \alpha_1}^M(\tau_2, \tau_1) = \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} E_n (\tau_2 - \tau_1)} \frac{\hbar \delta_{\alpha, \alpha_1}}{iE_n - (\varepsilon_\alpha - \mu)} \quad (\text{B.74})$$

Es folgt mit (B.73):

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \sum_{\alpha_2} G_{\alpha \alpha_2}^{-1}(\tau, \tau_2) G_{\alpha_2, \alpha_1}^M(\tau_2, \tau_1) = \frac{1}{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \delta(\tau_2 - \tau_1) \delta_{\alpha, \alpha_2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} E_n (\tau_2 - \tau_1)} \quad (\text{B.75})$$

Mithilfe der Distributionenidentität

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta(x - m) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-2\pi i m x} \quad (\text{B.76})$$

und (B.64) gilt schließlich:

$$\begin{aligned}
 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \sum_{\alpha_2} G_{\alpha\alpha_2}^{-1}(\tau, \tau_2) G_{\alpha_2, \alpha_1}^M(\tau_2, \tau_1) &= \frac{-1}{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \delta(\tau - \tau_2) \delta_{\alpha, \alpha_2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \eta^m \delta\left(\frac{\tau_2 - \tau_1}{\hbar\beta} - m\right) \\
 &= - \sum_{m=-\infty}^{\infty} \eta^m \delta(\tau - \tau_1 - \hbar\beta m) \delta_{\alpha, \alpha_2} \quad (\text{B.77})
 \end{aligned}$$

Im letzten Schritt wurde (4.23) verwendet. Speziell für $\tau, \tau_1 \in (0, \hbar\beta)$ bleibt nur ein Summand bestehen und es folgt (B.72).

Anhang C

Historische Ideenfolge zur Bose-Einstein-Kondensation

Als Ergänzung zu den Ausführungen des Abschnitts 1.3 bleibt die historische Ideenfolge von Interesse, weil diese einen vertieften Zugang zum Phänomen gewährt. Auch zeigt sich, wie wenig selbstverständlich der übliche Ansatz des Unbestimmtheitsmaßes für identische Quanten (auf Basis der Boltzmannschen Arbeit) ist, aus dessen Extremalisierung mithilfe der Methode der Lagrange Multiplikatoren die Bose-Einstein-Verteilungsfunktion folgt.

Bose findet 1924 in [10] eine neue Ableitung des Planckschen Strahlungsgesetzes, indem er, um den Koeffizienten $\frac{8\pi\nu^2}{c^3}$ zu erhalten die Zellen im Einteilchenphasenraum abzählt, statt wie Planck die mögliche Zahl unterschiedlicher stehenden Wellen, die in eine Box des Volumens V passen abzuzählen. Bose setzt also nicht länger die Wellennatur des Lichtes voraus und entkoppelt damit die Plancksche Strahlungsformel von allen Elementen der klassischen Elektrodynamik:

Bose setzt zwei mögliche Polarisationsrichtungen für Licht an¹ und integriert über die Phasenraumzellen $d^3x d^3p$:

$$2 \int_V d^3x \int_p^{p+dp} d^3p' = 8\pi V p^2 dp = \frac{8\pi\nu^2 d\nu}{c^3} V h^3 = Z^s h^3 \quad (\text{C.1})$$

Damit ist Z^s die Anzahl der Zellen der Größe h^3 im Einteilchenphasenraum. Im zweiten Schritt wird $p = \frac{h\nu}{c}$ verwendet. Dies begründet die Rühmlichkeit dieser Ableitung, denn der Compton Effekt wurde erst 1923 veröffentlicht [71], so dass es damals noch keine Selbstverständlichkeit war, Lichtwellen einen Impuls zuzuordnen.

¹Diese zusätzlichen (Spin)freiheitsgrade wurden damals von Bose und ebenso von Einstein einfach akzeptiert, weil es einerseits in Hinblick auf das bekannte Ergebnis notwendig erschien, andererseits 1925 noch keine Klarheit über das Wesen der Drehimpulserhaltung in der Quantentheorie bestand.

Es sei mit p_r^s die Zahl der Zellen, die je r Quanten mit Frequenz ν^s enthalten, bezeichnet. Dann ist $Z^s = \sum_r p_r^s$ die Gesamtzahl der Zellen, $N^s = \sum_r r p_r^s$ die Gesamtzahl der Systemteilchen, die die Frequenz ν^s haben. Die Gesamtphotonenzahl ist dann durch $N = \sum_s N^s$ und die Systemenergie durch $E = \sum_s N^s h\nu^s$ gegeben. Bose setzt auf dieser Grundlage *kommentarlos*² folgendes Unbestimmtheitsmaß an:

$$W = \prod_s \frac{Z^s!}{p_0^s! p_1^s! p_2^s! \dots} \quad (\text{C.3})$$

an und extremalisiert dasselbe unter den Nebenbedingungen erhaltener Energie und *kommentarlos* angenommener Erhaltung der Phasenraumzellen Z^s . Dadurch erhielt er

$$W = \sum_{r,s} \delta_r^s \left(1 + \ln p_r^s + \lambda_1 + \frac{r h \nu^s}{\beta} \right) \quad (\text{C.4})$$

und schließlich das Planck-Gesetz.

Einstein muss den Zusammenhang förmlich gewittert haben. Er sah, dass der Koeffizient der Planck-Formel ebenso durch Abzählen der Modenzahl klassischer Wellen, wie durch Abzählen der Ort-Impuls-Möglichkeiten eines Teilchens gewonnen werden kann. Natürlich konnte dies kein Zufall sein. Weder die Teilchennatur noch die Wellennatur ist exklusive Vorraussetzung für die Ableitung der Planck-Formel. Da muss ihm De Broglies Idee der Materiewellen gerade recht gekommen sein! (Dies war die erste Anwendung der Materiewellen und Schrödinger etwa erfuhr erst aus Einsteins Arbeit davon.) Einstein nahm also eine allgemeine Identität zwischen Teilchen und Welle an und untersuchte, welche Prämissen sich aus Boses Ideen für massive Teilchen ergeben.

Einstein setzt Teilchenzahlerhaltung an, was auf eine zusätzliche Nebenbedingung in Boses Extremwertproblem führt, dem ein weiterer Lagrange-Multiplikator Rechnung trägt. Weiter setzt er den für Teilchen mit Ruhemasse gültigen Ausdruck $h^3 Z^s = 2\pi V (2m)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E^s} dE^s$ mit $2mE^s = p^{s2}$ an. Schließlich erhielt er durch Extremalisierung des Unbestimmtheitsmaßes den Ausdruck

$$N = \sum_s N^s = \sum_s \frac{1}{\lambda_2^{-1} e^{\frac{E^s}{k_B T}} - 1} \quad (\text{C.5})$$

Einstein bemerkte, dass der „Entartungsparameter“ $\lambda_2 \leq 1$ erfüllen muss (weil sich andernfalls bei hinreichend hoher Temperatur negative Besetzungszahlen ergäben). Er ersetzt dann die Summe in (C.5) durch Übergang zum Thermodynamischen Limes durch

²Einstein verwendet, in Folge einer „Rüfung“ P. Ehrenfests statt Boses Ausdruck (C.3) ein Äquivalent in Bernoulli-Form:

$$W = \prod_s \frac{(N^s + Z^s - 1)!}{N^s! (Z^s - 1)!} \quad (\text{C.2})$$

Er zählt also die Möglichkeiten N ununterscheidbare Teilchen im Intervall dE^3 auf Z^s Zellen zu verteilen. Die prinzipielle Ununterscheidbarkeit identischer Quanten war damals noch nicht allgemein anerkannt und auch Einstein liefert weder eine Erwähnung dieses Faktums noch eine Begründung, doch die Verwendung des Unbestimmtheitsmaßes (C.2) statt (C.3) zeigt, dass er sich der Vorraussetzung bewusst war.

ein Integral über die Phasenraumzellen, ähnlich wie in Abschnitt 3.2.1. In der ersten Arbeit [11] untersucht er die Konsequenzen im Fall $\lambda_2 \ll 1$. In [12] geht er auf den Grenzfall $\lambda_2 = 1$ ein, erhält

$$k_B T_0 = \frac{h^2}{2m[\nu_0 \zeta(3/2)]^{\frac{3}{2}}} \quad (\text{C.6})$$

und quittiert seine Frage was im Fall $T < T_0$ geschehe mit: „etwas ähnliches Eintritt wie beim isothermen Komprimieren eines Dampfes über das Sättigungsvolumen. Es tritt eine Scheidung ein; ein Teil kondensiert, der Rest bleibt ein gesättigtes ideales Gas“.

Es ist bemerkenswert, dass die theoretische Begründung der BEK dem Verständnis für die Symmetriebedingungen der Wellenfunktion von Vielteilchenquantensystemen zeitlich vorangeht. Nach Entwicklung der Fermi-Diracschen-Verteilungsfunktion 1926, im Zuge des Paulischen Ausschließungsprinzips von 1925 blieb kurzfristige Unklarheit über die Anwendungsbedingungen der Statistiken und es wurden Zweifel ob der Existenz von Teilchen, die der Einsteinschen Theorie genügen, laut. Erst nach Ersetzung der klassischen Schreibweise für Observablen durch Operatoren, bei Formulierung der Quantenmechanik 1925/26 konnte die Existenz zweier unterschiedlicher Teilchensorten als Konsequenzen der Ununterscheidbarkeit identischer Teilchen mithilfe des Paritätsoperators leicht begriffen werden.

Anhang D

Paramagnetismus des Maxwell-Boltzmann-Gases

Zwar ist das Maxwell-Boltzmann-Gas an sich von geringem Interesse, doch verhilft es, wie in Abschnitt 1.3 diskutiert, zu einem analytischen Zugang zur Asymptotik interessanter Größen bei hohen Temperaturen. Insbesondere kann die Asymptotik der magnetischen Suszeptibilität für beliebig starke Felder verstanden werden.

Sowohl Bose-Einstein-, als auch Fermi-Dirac-Statistik konvergieren für hohe Temperaturen gegen die klassische Boltzmann Statistik. Die in den Identitäten (3.25) und (3.29) auftretenden Parameter μ und α rühren allein von der Verteilungsfunktion her. Auch in den dynamischen Größen (2.51) und (2.52) unterscheiden sich die Teilchensorten nur über die Verteilungsfunktion. Deshalb müssen schließlich alle thermodynamischen und dynamischen Resultate für hohe Temperaturen gegen die Resultate des Maxwell-Boltzmann Gases konvergieren.

Mithilfe von

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{\zeta_{\frac{3}{2}}(\eta \lambda_{\sigma})}{\eta} = \lim_{\eta \rightarrow 0} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\eta^l \lambda_{\sigma}^l}{l^{\frac{3}{2}} \eta} = \lambda_{\sigma}, \quad (\text{D.1})$$

wobei (E.21) verwendet wurde, lauten (3.25) und (3.29):

$$\sum_{\sigma=-F}^F \sigma e^{\beta(\mu+\alpha\sigma)} = M^* n \lambda_T^3 \quad (\text{D.2})$$

$$\sum_{\sigma=-F}^F e^{\beta(\mu+\alpha\sigma)} = n \lambda_T^3 \quad (\text{D.3})$$

Es folgt:

$$M^* = \frac{\sum_{\sigma=-F}^F \sigma e^{\beta(\mu+\alpha\sigma)}}{\sum_{\sigma=-F}^F e^{\beta(\mu+\alpha\sigma)}} \quad (\text{D.4})$$

Dies lässt sich mithilfe der Brillouin Funktionen

$$B_k(x) := \frac{2k+1}{2k} \coth\left(\frac{2k+1}{2k}x\right) - \frac{1}{2k} \coth\left(\frac{1}{2k}x\right) \quad (\text{D.5})$$

in folgenden Ausdruck umformen:

$$M^*(\alpha, \beta) = FB_J(J\alpha\beta) \quad (\text{D.6})$$

Damit ist der übliche Ausdruck für die Magnetisierung unterscheidbarer magnetischer Momente, der in der statistischen Mechanik durch Berechnung der Zustandssumme folgt, reproduziert. Speziell für $F = 1$ gilt mit $B_1(x) = \frac{2\sinh(x)}{1+2\cosh(x)}$:

$$M^*(\alpha, T) = \frac{2\sinh\left(\frac{\alpha}{k_B T}\right)}{1+2\cosh\left(\frac{\alpha}{k_B T}\right)} \quad (\text{D.7})$$

oder:

$$\alpha = k_B T \ln\left(\frac{M^* + \sqrt{4 - 3M^{*2}}}{2 - 2M^*}\right) \quad (\text{D.8})$$

Ebenso gilt für $F = \frac{1}{2}$ mit $B_{\frac{1}{2}}(x) = \tanh(x)$:

$$M(\alpha, T) = F \tanh(F\alpha\beta) \quad (\text{D.9})$$

Daraus folgt ein analytisches Resultat für die reduzierte innere magnetische Suszeptibilität. Für $F = 1$ gilt:

$$\frac{\partial M^*}{\partial \alpha} = \frac{2(2 + \cosh\left(\frac{\alpha}{k_B T}\right))}{k_B T(1 + \cosh\left(\frac{\alpha}{k_B T}\right))^2} \xrightarrow{\alpha \rightarrow 0} \frac{2}{3k_B T} \quad (\text{D.10})$$

Diese Gleichung entspricht genau dem für Bosonen und Fermionen im Limes $T \rightarrow \infty$ erhaltenen Ergebnis (3.84) und (6.1). Das Maxwell-Boltzmann-Gas erfüllt also für alle Temperaturen ein Curie-Gesetz. Das Gesamtmagnetfeld α steigt linear mit der Temperatur. Die übliche Ableitung des Curie Gesetzes erfolgt auf einem Ising-Gitter, wo die Teilchen aufgrund der Lokalisation unterscheidbar sind und deshalb der Boltzmann-Statistik genügen (vgl. z.B. [72]). Es wird jetzt (D.10) nach der Magnetisierung entwickelt, um explizite Korrekturterme für starke Felder zu erhalten:

$$\alpha = \frac{3}{2}k_B T M^* + \frac{9}{16}k_B T M^{*3} + \mathcal{O}(M^{*5}) \quad (\text{D.11})$$

Es kann jetzt auch das chemische Potential berechnet werden und damit schließlich die thermische Besetzung der Zeeman-Niveaus im Hochtemperaturbereich. Einsetzen von (D.8) in (D.3) ergibt nach Auflösen:

$$\mu = -T \ln \left(\frac{(2F+1) \left(\frac{mk_B}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} T^{\frac{3}{2}}}{-1 + \sqrt{4 - 3M^{*2}}} \right) \quad (\text{D.12})$$

Auch hier ist eine Entwicklung nach der Magnetisierung aufschlussreich:

$$\mu = -T \left[\ln \left((2F+1) \left(\frac{mk_B}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} T^{\frac{3}{2}} \right) + \frac{3M^{*2}}{4} + \frac{27M^{*4}}{64} + \mathcal{O}(m^6) \right] \quad (\text{D.13})$$

Mit (D.1) vereinfacht sich (3.65) zu:

$$C_\sigma = \frac{1}{n} \left(\frac{mk_B}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} T^{\frac{3}{2}} e^{\beta(\mu + \alpha\sigma)} \quad (\text{D.14})$$

Einsetzen von (D.8) und (D.12) ergibt folgende thermische Besetzung der Zeeman-Zustände des Maxwell Boltzmann Gases:

$$C_\sigma = \frac{1}{2F+1} (\sqrt{4 - 3M^{*2}})^{\sigma} e^{\left(\frac{M^* + \sqrt{4 - 3M^{*2}}}{2 - 2M^*} \right)} \quad (\text{D.15})$$

Im neutralen System gilt mit $M^* = 0$ einfach $C_\sigma = \frac{1}{2F+1}$. Fürs Maxwell-Boltzmann-Gas ist also die thermische Besetzung der Zeeman-Niveaus temperaturunabhängig. Gegen diese Besetzungsverteilung konvergiert die thermische Besetzung im Limes $T \rightarrow \infty$ für Fermi- und Bose-Gase.

Anhang E

Identitäten, Definitionen, Integrale

E.1 Kommutatoridentitäten

Es werden die in Kapitel 2.3.1 benötigten Kommutatoridentitäten zwischen einem Hamiltonoperator vom Einteilchentyp und bestimmten Kombinationen aus Konstruktionsoperatoren bereitgestellt. Da kein zusätzlicher Aufwand entsteht, sind die Berechnungen allgemein gehalten. Sei \hat{O} ein Operator vom Einteilchentyp, d.h. seine Darstellung im Fock Raum lautet: $\hat{O} = \sum_{k,l} \hat{a}_k^+ o_{kl} \hat{a}_l$. Darin ist jeder Index α als vollständiger Quantenzahlensatz des Einteilchenhilbertraums und die Zustände $\{|\alpha\rangle\}$ als entsprechende orthonormierte Eigenzustände zu verstehen. Mit

$$[\hat{a}_\alpha, \hat{a}_{\alpha'}^+]_{-\eta} = \delta_{\alpha, \alpha'} \quad (\text{E.1})$$

und

$$[\hat{a}_\alpha, \hat{a}_{\alpha'}]_{-\eta} = [\hat{a}_\alpha^+, \hat{a}_{\alpha'}^+]_{-\eta} = 0 \quad (\text{E.2})$$

folgt für Bosonen:

$$\begin{aligned} [\hat{O}, \hat{a}_\alpha^+]_{-} &= \sum_{\alpha', \alpha''} [\hat{a}_{\alpha'}^+ o_{\alpha' \alpha''} \hat{a}_{\alpha''}, \hat{a}_\alpha^+]_{-} \\ &= \sum_{\alpha', \alpha''} \hat{a}_{\alpha'}^+ o_{\alpha' \alpha''} [\hat{a}_{\alpha''}, \hat{a}_\alpha^+]_{-} + [\hat{a}_{\alpha'}^+, \hat{a}_\alpha^+]_{-} o_{\alpha' \alpha''} \hat{a}_{\alpha''} \\ &= \sum_{\alpha', \alpha''} \hat{a}_{\alpha'}^+ o_{\alpha' \alpha''} \delta_{\alpha'', \alpha} = \sum_{\alpha'} \hat{a}_{\alpha'}^+ o_{\alpha' \alpha} \end{aligned} \quad (\text{E.3})$$

Eine analoge Rechnung führt auf

$$[\hat{O}, \hat{a}_\alpha]_{-} = -\sum_{\alpha'} \hat{a}_{\alpha'} o_{\alpha \alpha'} \quad (\text{E.4})$$

Für Fermionen gilt indessen:

$$\begin{aligned}
 [\hat{O}, \hat{a}_\alpha^+]_- &= \sum_{\alpha', \alpha''} \underbrace{[\hat{a}_{\alpha'}^+ o_{\alpha' \alpha''} \hat{a}_{\alpha''}^+, \hat{a}_\alpha^+]_-}_{\hat{a}_{\alpha'}^+ o_{\alpha' \alpha''} [\hat{a}_{\alpha''}^+, \hat{a}_\alpha^+]_- + [\hat{a}_{\alpha'}^+, o_{\alpha' \alpha''}]_- o_{\alpha' \alpha''} \hat{a}_{\alpha''}^+} \\
 &= \sum_{\alpha'} a_{\alpha'}^+ o_{\alpha' \alpha} + 2 \sum_{\alpha', \alpha''} - \hat{a}_{\alpha'}^+ o_{\alpha' \alpha''} \hat{a}_\alpha^+ \hat{a}_{\alpha''}^+ + \hat{a}_{\alpha'}^+ a_\alpha^+ o_{\alpha' \alpha''} \hat{a}_{\alpha''}^+ \\
 &= \sum_{\alpha'} \hat{a}_{\alpha'}^+ o_{\alpha' \alpha} \tag{E.5}
 \end{aligned}$$

Ebenso:

$$[\hat{O}, \hat{a}_\alpha]_- = - \sum_{\alpha'} \hat{a}_{\alpha'} o_{\alpha \alpha'} \tag{E.6}$$

Einsetzen dieser für Fermionen und Bosonen identischen Resultate ergibt für Fermionen und Bosonen sofort:

$$[\hat{a}_\alpha^+ \hat{a}_{\alpha'}, \hat{O}]_{-\eta} = \hat{a}_\alpha^+ [\hat{a}_{\alpha'}, \hat{O}]_{-\eta} + [\hat{a}_\alpha^+, \hat{O}]_{-\eta} \hat{a}_{\alpha'} = \hat{a}_\alpha^+ \hat{a}_{\alpha'} (o_{\alpha' \alpha'} - o_{\alpha \alpha}) \tag{E.7}$$

Weiter folgt analog zur obigen Rechnungen folgende für Bosonen und Fermionen gültige Relation:

$$[\hat{a}_\alpha^+ \hat{a}_{\alpha'}, \hat{a}_{\alpha'}^+ \hat{a}_\alpha]_{-\eta} = \hat{a}_\alpha^+ \hat{a}_\alpha - \hat{a}_{\alpha'}^+ \hat{a}_{\alpha'} \tag{E.8}$$

Betrachtung von

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{a}_{\alpha_i} \hat{a}_{\alpha_j}^+ \rangle &= \frac{1}{Z_G} \text{Tr} \{ \hat{a}_{\alpha_i} \hat{a}_{\alpha_j}^+ e^{-\beta \hat{H}} \} = \frac{1}{Z_G} \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \dots} \langle \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_i, \dots | \hat{a}_{\alpha_i} \hat{a}_{\alpha_j}^+ e^{-\beta \hat{H}} | \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_j, \dots \rangle \\
 &= \frac{1}{Z_G} \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \dots} \sqrt{n_{\alpha_i} + 1} \sqrt{n_{\alpha_j} + 1} \underbrace{\langle \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_i + 1, \dots | \alpha'_1, \alpha'_2, \dots, \alpha'_{j+1}, \dots \rangle}_{\delta_{\alpha_1, \alpha'_1} \delta_{\alpha_2, \alpha'_2} \dots \delta_{\alpha_i + 1, \alpha'_i} \dots \delta_{\alpha_j, \alpha'_{j+1}} \dots} \\
 &\times e^{-\beta E_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_i - 1, \dots, \alpha_j + 1, \dots}} \\
 &= (n_{\alpha_i} + 1) \delta_{\alpha_i, \alpha_j} \tag{E.9}
 \end{aligned}$$

liefert mit (E.1) und (E.8)

$$\langle [\hat{a}_\alpha, \hat{a}_{\alpha'}^+]_{-\eta} \rangle = \delta_{\alpha, \alpha'} \tag{E.10}$$

$$\langle [\hat{a}_\alpha^+ \hat{a}_{\alpha'}, \hat{a}_{\alpha'}^+ \hat{a}_\alpha]_{-\eta} \rangle = \langle \hat{n}_\alpha \rangle - \langle \hat{n}_{\alpha'} \rangle = n_\alpha - n_{\alpha'} \tag{E.11}$$

E.2 Dirac-Identität

Betrachte:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{x \pm i\epsilon} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{x}{x^2 - \epsilon^2} \mp i \frac{\epsilon}{x^2 - \epsilon^2} \tag{E.12}$$

Mit:

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\epsilon}{x^2 - \epsilon^2} = \frac{1}{x - \frac{\epsilon^2}{x}} = \begin{cases} \frac{1}{x}, & x \neq 0 \\ P\left(\frac{1}{x}\right), & \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{E.13})$$

und der Dirac Lorentz Darstellung der Delta Distribution:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\epsilon}{x^2 - \epsilon^2} = \pi \delta(x) \quad (\text{E.14})$$

ist die folgende Dirac-Identität gezeigt:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{x \pm i\epsilon} = P\left(\frac{1}{x}\right) \mp i\pi \delta(x) \quad (\text{E.15})$$

E.3 Integraldarstellung der Stufenfunktion

Es wird ein konstruktiver Beweis der Integraldarstellung der Stufenfunktion angeführt. Die Definition der Stufenfunktion lautet:

$$\theta(t) = \begin{cases} 1 & ; t > 0 \\ 0 & ; t < 0 \end{cases} \quad (\text{E.16})$$

An der Stelle $t = 0$ ist sie nicht definiert.

Ausgangsidee ist die Wahl einer Funktion mit Residuum in der unteren komplexen Halbebene und ohne Residuum in der oberen Halbebene derart zu wählen, deren Contour Integral in beiden Fällen verschwindet. Betrachte

$$\oint dx \frac{e^{-ixt}}{x + i0^+} = 0 \quad (\text{E.17})$$

und schließe das Contour Integral im Falle $t > 0$ durch einen Weg γ_1 im Unendlichen der oberen komplexen Halbebene und im Falle $t < 0$ durch einen Weg γ_2 im Unendlichen der Unteren. Weil das Countour Integral verschwindet, gilt:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{e^{-ixt}}{x + i0^+} = \begin{cases} -\int_{\gamma_1} \frac{e^{-ixt}}{x + i0^+} = 0 & , t < 0 \\ -\int_{\gamma_2} \frac{e^{-ixt}}{x + i0^+} = -2\pi i \text{Res}(-i0^+) & , t > 0 \end{cases} \quad (\text{E.18})$$

Mit

$$\text{Res}(-i0^+) = \lim_{x \rightarrow -i0^+} \frac{x + i0^+ e^{-ixt}}{x + i0^+} = 1 \quad (\text{E.19})$$

folgt eine Integraldarstellung der Stufenfunktion:

$$\theta(t) = -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{e^{-ixt}}{x + i0^+} \quad (\text{E.20})$$

E.4 Polylogarithmus

Der Polylogarithmus ist definiert durch:

$$\zeta_\nu(z) := \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l^\nu} \quad (\text{E.21})$$

Der Zusammenhang zur gewöhnlichen Zeta-Funktion $\zeta(z)$ ist durch folgende Gleichung gegeben.

$$\zeta_\nu(1) = \zeta(\nu) \quad (\text{E.22})$$

Weiter gilt:

$$\zeta_1(z) = -\ln(1-z) \quad (\text{E.23})$$

Dies zeigt ein Vergleich mit der Reihendarstellung des natürlichen Logarithmus:

$$\begin{aligned} \ln(1+z) &= \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^{l+1} \frac{z^l}{l} \\ \implies -\ln(1-z) &= \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^l \frac{(-z)^l}{l} = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l} = \zeta_1(z) \end{aligned} \quad (\text{E.24})$$

Für natürliche Indizes $\nu \in \mathbb{N}$ gilt die Rekursionsrelation:

$$\zeta_{\nu+1}(z) = \int_0^z d\tilde{z} \frac{\zeta_\nu(\tilde{z})}{\tilde{z}} \quad (\text{E.25})$$

Dies folgt unmittelbar aus der Definition:

$$\int_0^z d\tilde{z} \frac{\zeta_\nu(\tilde{z})}{\tilde{z}} = \sum_{l=1}^{\infty} \int_0^z d\tilde{z} \frac{\tilde{z}^{l-1}}{l^\nu} = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l \cdot l^\nu} = \zeta_{\nu+1}(z) \quad (\text{E.26})$$

Der Polylogarithmus ist an der Stelle $z = 1$ nur dann endlich, wenn $\nu \geq 1$ ist. Die Divergenz der Reihe an der Stelle $z = 1$ ist für $\nu \leq 1$ offensichtlich: Sie stellt eine Majorante zur harmonischen Reihe dar.

E.5 Lösung einiger Integrale

Das bekannte Ergebnis des Gauß-Integrals

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \quad (\text{E.27})$$

ergibt sich wie folgt:

$$\left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} \right)^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 e^{-\alpha(x_1^2+x_2^2)} \quad (\text{E.28})$$

Umschreiben in ebene Polarkoordinaten führt auf

$$e^{-\alpha(x_1^2+x_2^2)} = \int_{-\infty}^{\infty} dr \int_0^{2\pi} r d\varphi e^{-\alpha r^2} = 2\pi \int_0^{\infty} dr r e^{-\alpha r^2} = \frac{-\pi}{\alpha} e^{-\alpha r^2} \Big|_0^{\infty} = \frac{\pi}{\alpha} \quad (\text{E.29})$$

womit (E.27) gezeigt ist.

Es gelten die folgenden Integrale für beliebige $a, b, \alpha \in \mathbb{C}$, wobei $\Re\alpha > 0$ vorrauszusetzen ist, um Konvergenz zu garantieren:

$$\int_0^{\infty} dx \frac{x^2}{ae^{\alpha x^2} - b} = \frac{\sqrt{\pi}}{4b\alpha^{\frac{3}{2}}} \zeta_{\frac{b}{a}} \quad (\text{E.30})$$

$$\int_0^{\infty} dx \frac{x^{n-1}}{ae^{\alpha x^n} - b} = \frac{1}{\alpha b n} \zeta_1(b/a) \quad (\text{E.31})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{ae^{\alpha x^2} - b} = -\sqrt{\pi} \zeta_{\frac{1}{2}}\left(-\frac{1}{a}\right) \quad (\text{E.32})$$

Beweis von (E.30): Den Ausgangspunkt stellt folgende Identität dar:

$$-\frac{1}{b} \frac{\partial}{\partial \alpha} \ln \left(\frac{1}{b} - \frac{e^{-\alpha x^2}}{a} \right) = \frac{x^2}{ae^{\alpha x^2} - b} \quad (\text{E.33})$$

Mit (E.24) gilt

$$\ln \left(\frac{1}{b} - \frac{e^{-\alpha x^2}}{a} \right) = -\sum_{l=1}^{\infty} \left(\frac{b}{a} \right)^l \frac{e^{-l\alpha x^2}}{l} + \ln \left(\frac{1}{b} \right) \quad (\text{E.34})$$

und weiter:

$$\int_0^{\infty} dx \frac{x^2}{ae^{\alpha x^2} - b} = -\frac{1}{b} \frac{\partial}{\partial \alpha} \sum_{l=1}^{\infty} \left(\frac{b}{a} \right)^l \frac{1}{l} \int_0^{\infty} dx e^{-l\alpha x^2} \quad (\text{E.35})$$

Einsetzen von

$$\int_0^{\infty} dx e^{-\alpha x^2} = \sqrt{\frac{\pi}{4\alpha}} \quad (\text{E.36})$$

gemäß (E.27) liefert zusammen mit der Definition (E.21) das Ergebnis (E.30)

Beweis von (E.31):

Ausgangspunkt ist jetzt die Identität:

$$-\frac{1}{\alpha b n} \frac{\partial}{\partial x} \ln \left(\frac{1}{b} - \frac{e^{-\alpha x^n}}{a} \right) = \frac{x^{n-1}}{ae^{\alpha x^n} - b} \quad (\text{E.37})$$

Daraus folgt unmittelbar

$$\int_0^x dx' \frac{x'^{n-1}}{ae^{\alpha x'^n} - b} = -\frac{1}{\alpha b n} \ln \left(1 - \frac{b}{a} e^{-\alpha x^n} \right) \quad (\text{E.38})$$

Insbesondere ergibt sich hieraus mit $x := \infty$ (E.31).

Die Lösung des Integrals (E.32) kann ähnlich wie die von (E.30) konstruiert werden. Betrachte:

$$-\frac{\partial}{\partial B} \ln \left(ae^{-\alpha x^2} - b \right) = \frac{1}{ae^{\alpha x^2} - b} \quad (\text{E.39})$$

Daraus folgt mit (E.27):

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \frac{dx}{ae^{\alpha x^2} - b} &= -\frac{\partial}{\partial b} \int_0^\infty dx \left[\ln(a) + \ln \left(1 - \frac{b}{a} e^{-\alpha x^2} \right) \right] \\ &= -\frac{\partial}{\partial b} \sum_{l=1}^\infty \frac{1}{l} \left(\frac{b}{a} \right)^l \int_0^\infty dx e^{-\alpha x^2} = \frac{-\sqrt{\pi}}{2b\sqrt{\alpha}} \zeta_{\frac{1}{2}} \left(\frac{b}{a} \right) \end{aligned} \quad (\text{E.40})$$

Anhang F

Reduzierte Einheiten

F.1 Homogene Systeme

Um universale Gleichungen und Grafiken zu erhalten, d.h. solche die nicht von systemspezifischen Parametern wie etwa der Masse der Teilchen oder der Teilchendichte des Systems abhängen ist es zweckmäßig geeignete Einheitsgrößen zu definieren. Die Idee ist sogenannte reduzierte Einheiten derart zu definieren, dass dieselben sich in allen interessierenden Gleichungen aufheben:

$$\text{Energieeinheit: } \varepsilon_u := \frac{\hbar^2 k_u^2}{2m}$$

$$\text{inverse Längeneinheit: } k_u := 2\left(\frac{6\pi^2 n}{2F+1}\right)^{\frac{1}{3}}$$

(Für Elektronen ist diese Längeneinheit durch den Durchmesser der Fermikugel gegeben)

$$\text{inverse Zeiteinheit: } \omega_u := \frac{\varepsilon_u}{\hbar}$$

$$\text{Temperatureinheit: } T_u = \frac{\varepsilon_u}{k_B}$$

Damit können alle folgenden Gleichungen dimensionslos geschrieben werden. Reduzierte Größen werden zur Unterscheidung mit einem * gekennzeichnet. Eine Größe A lautet in reduzierten Einheiten $A = A^* A_u$. Die Definitionen gewähren natürlich, für spezielle Systeme jederzeit die Ergebnisse in konventionellen Einheiten aus denen in reduzierten Einheiten zu rekonstruieren.

$$\text{Damit gilt auch: } \beta = \frac{1}{\varepsilon_u t}, \lambda_\sigma = e^{\frac{\mu^* + \sigma \alpha^*}{t}} \text{ und } n \lambda_T^3 = t^{-\frac{3}{2}} \frac{(2F+1)}{6\sqrt{\pi}}$$

F.2 Inhomogene Systeme

Bei Anwesenheit eines Fallenpotentials sind Systemvolumen und Teilchendichte nicht mehr definiert. Die oben definierten reduzierten Einheiten sind folglich für solche Systeme

nicht sinnvoll erklärt. Zudem treten in den Gleichungen des Kapitels (7) die Teilchenzahl und auch die mittlere Fallenfrequenz $\overline{\omega^2}$ als Parameter auf. Damit die Auftragungen dieser Gleichungen dennoch möglichst viele Parametersätze einschließen, müssen neue reduzierte Einheiten definiert werden:

$$\text{Energieeinheit: } \varepsilon_u := \left(\frac{N}{2F+1} \right)^{\frac{1}{3}} \hbar \sqrt{\omega^2}$$

$$\text{inverse Längeneinheit: } k_u = \frac{\sqrt{2m\varepsilon_u}}{\hbar} = \sqrt{\left(\frac{N}{2F+1} \right)^{\frac{1}{3}} \frac{2m\sqrt{\omega^2}}{\hbar}}$$

$$\text{Temperatureinheit: } T_u = \frac{\varepsilon_u}{k_B} = \left(\frac{N}{2F+1} \right)^{\frac{1}{3}} \frac{\hbar \sqrt{\omega^2}}{k_B}$$

$$\text{inverse Zeiteinheit: } \omega_u = \frac{\varepsilon_u}{\hbar} = \left(\frac{N}{2F+1} \right)^{\frac{1}{3}} \sqrt{\omega^2}$$

Damit gilt auch:

$$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\beta}{\pi \varepsilon_{\mathbf{q}}}} = \frac{1}{2\varepsilon_u \sqrt{q^* T^* \pi}}$$

$$\left(\beta m \overline{\omega^2} \right)^{\frac{3}{2}} = \frac{1}{2^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{2F+1}{N} \right) \frac{k_u^3}{T^{*\frac{3}{2}}}$$

$$\frac{1}{N \lambda_T^3} = \frac{1}{8} \frac{k_u^3}{N} \left(\frac{t}{\pi} \right)^{\frac{3}{2}}$$

Abbildungsverzeichnis

1.1	Typisches p-T-Phasendiagramm	12
1.2	Versuchsanordnung zur Bragg-Spektroskopie	19
1.3	Beispielmessung zur Bragg-Spektroskopie	19
3.1	T-M-Phasendiagramm von Spinor-Bosonen	42
3.2	Bose-Einstein-Kondensatdichte spinentarteter Bosonen	48
3.3	Thermische Dichte spinentarteter Bosonen	48
3.4	Bose-Einstein-Kondensatdichte schwach polarisierter Spinor-Bosonen	49
3.5	Thermische Besetzung der Zeeman-Niveaus durch schwach polarisierte Spinor-Bosonen	49
3.6	Bose-Einstein-Kondensatdichte stark polarisierter Spinor-Bosonen	50
3.7	Thermische Besetzung der Zeeman-Niveaus durch stark polarisierte Spinor-Bosonen	50
3.8	Temperaturabhängiges chemisches Potential spinentarteter Bosonen	53
3.9	Temperaturabhängiges chemisches und magnetochemisches Potential schwach polarisierter Spinor-Bosonen	53
3.10	Temperaturabhängiges chemisches und magnetochemisches Potential stark polarisierter Spinor-Bosonen	53
3.11	Temperaturabhängiges chemisches und magnetochemisches Potential fast vollständig polarisierter Spinor-Bosonen	53
3.12	Innere magnetische Suszeptibilität von Spinor-Bosonen	58
4.1	Energieabhängige Magnetisierungs- und Teilchendichte-Spektralfunktion von spinentarteten und Spinor-Bosonen	67
4.2	Energieabhängige longitudinale Teilchenstrom-Spektralfunktion von spinentarteten und Spinor-Bosonen	76
4.3	Energieabhängige transversale Teilchenstrom-Korrelationsfunktion von spinentarteten und Spinor-Bosonen	77
4.4	Temperaturabhängige transversal-statische Suszeptibilität spinentarteter Bosonen	84
4.5	Temperaturabhängige transversal-statische Suszeptibilität von schwach polarisierten Spinor-Bosonen	84

4.6	Temperaturabhängige transversal statische Suszeptibilität von stark polarisierten Spinor-Bosonen	84
5.1	Superfluide Dichte spinentarteter-Bosonen	92
5.2	Superfluide Dichte von Spinor-Bosonen	92
5.3	Dynamischer Strukturfaktor von spinentarteten und Spinor-Bosonen	96
5.4	Statischer Strukturfaktor von spinentarteten und Spinor-Bosonen	98
6.1	Temperaturabhängiges chemisches und magnetochemisches Potential spinentarteter Fermionen	101
6.2	Temperaturabhängiges chemisches und magnetochemisches Potential schwach polarisierter Fermionen	101
6.3	Temperaturabhängiges chemisches und magnetochemisches Potential stark polarisierter Fermionen	102
6.4	Temperaturabhängiges chemisches und magnetochemisches Potential fast vollständig polarisierter Fermionen	102
6.5	Magnetisierungsabhängige Fermienergie idealer Spin $\frac{1}{2}$ -Fermionen	105
6.6	Innere magnetische Suszeptibilität homogener Spin- $\frac{1}{2}$ -Fermionen bei $T = 0$	105
6.7	Energieabhängiges Teilchenzahl-Spektralfunktion von spinentarteten und Spinor-Bosonen	106
6.8	Energieabhängige transversale Teilchenstrom-Spektralfunktion von spinentarteten und Spinor-Fermionen	107
7.1	T-M-Phasendiagramm von Spinor-Bosonen im harmonischen Potential . .	115
7.2	Vergleich der T-M-Phasendiagramme von homogenen Spinor-Bosonen und solchen im harmonischen Potential	115
7.3	Bose-Einstein-Kondensatdichte spinentarteter Bosonen im harmonischen Potential	119
7.4	Thermische Besetzung der Zeeman-Niveaus durch spinentartete Bosonen im harmonischen Potential	119
7.5	Bose-Einstein-Kondensatdichte schwach polarisierter Spinor-Bosonen im harmonischen Potential	119
7.6	Thermische Besetzung der Zeeman-Niveaus durch schwach polarisierte Spinor-Bosonen im harmonischen Potential	119
7.7	Bose-Einstein-Kondensatdichte stark polarisierter Spinor-Bosonen im harmonischen Potential	120
7.8	Thermische Besetzung der Zeeman-Niveaus durch stark polarisierte Spinor-Bosonen im harmonischen Potential	120
7.9	Temperaturabhängiges chemisches Potential spinentarteter Bosonen im harmonischen Potential	121
7.10	Temperaturabhängiges chemisches Potential schwach polarisierter Spinor-Bosonen im harmonischen Potential	121

7.11	Temperaturabhängiges chemisches Potential stark polarisierter Spinor-Bosonen im harmonischen Potential	121
7.12	Innere magnetische Suszeptibilität von Spinor-Bosonen im harmonischen Potential	123
7.13	Ortsabhängige lokale thermische und Kondensatdichte von spinentarteten und Spinor-Bosonen im harmonischen Potential	126
7.14	Energieabhängige Teilchenzahl-Spektralfunktion von spinentarteten und Spinor Bosonen im harmonischen Potential in LDA-Näherung	129
7.15	Energieabhängige transversale Teilchenstrom-Spektralfunktion von spinentarteten und Spinor-Bosonen in LDA-Näherung	133
7.16	Magnetisierungsabhängiges chemisches Potential idealer Spinor-Fermionen im harmonischen Potential bei $T = 0$	135
7.17	Innere magnetische Suszeptibilität idealer Spinor-Fermionen im harmonischen Potential bei $T = 0$	136

Literaturverzeichnis

- [1] LIWANOWA, A.: *Lew Landau*. Verlag MIR, Moskau BSB B.G. Teubner Verlagsgesellschaft, 1982.
- [2] PITAEVSKII, L. und S. STRINGARI: *Bose-Einstein Condensation*. Clarendon Press, 2003.
- [3] PETHICK, C. J. und H. SMITH: *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*. Cambridge University Press, 2002.
- [4] GRIFFIN, A., T. NIKUNI und E. ZAREMBA: *Bose-Condensed Gases at Finite Temperatures*. Cambridge University Press, 2009.
- [5] PAIS, A.: *Raffiniert ist der Herrgott...: Albert Einstein. Eine wissenschaftliche Biographie*. Spektrum Akademischer Verlag, 2009.
- [6] ANDRONIKASHVILII, E.L.: *Reflections on Liquid Helium*. American Institute of Physics, New York, 1989.
- [7] GRIFFIN, A.: *A brief history of our understanding of BEC: From Bose to Beliaev*. Arxiv preprint cond-mat/9901123, 1999.
- [8] KETTERLE, W., D.S. DURFEE und D.M. STAMPER-KURN: *Making, probing and understanding Bose-Einstein condensates*. In: *Proceedings of the International School of Physics-Enrico Fermi*, Seite 67, 1999.
- [9] ANDERSON, M.H., J.R. ENSHER, M.R. MATTHEWS, C.E. WIEMAN und E.A. CORNELL: *Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor*. Science, 269:198, 1995.
- [10] BOSE, S.N.: *Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese*. Z. Phys, 26:3, 1924.
- [11] EINSTEIN, A.: *Zur Quantentheorie des idealen Gases*. Sitzungsberichte, Preussische Akademie der Wissenschaften, Bericht, 3:256, 1924.

- [12] EINSTEIN, A.: *Quantentheorie des einatomigen idealen Gases. Zweite Abhandlung.* Sitzungberichte, Preussische Akademie der Wissenschaften, Sitzung der physikalisch mathematischen Klasse vom 8.01.1925:3, 1925.
- [13] LONDON, F.: *The phenomenon of liquid helium and the Bose-Einstein degeneracy.* Nature, 141:643, 1938.
- [14] BELIAEV, S.T.: *Energy spectrum of a non-ideal Bose gas.* Sov. Phys. JETP, 34:299, 1958.
- [15] DAVIS, K.B., M.O. MEWES, M.R. ANDREWS, N.J. VAN DRUTEN, D.S. DURFEE, D.M. KURN und W. KETTERLE: *Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms.* Physical Review Letters, 75:3969, 1995.
- [16] MEWES, M.O., M.R. ANDREWS, D.M. KURN, D.S. DURFEE, C.G. TOWNSEND und W. KETTERLE: *Output coupler for Bose-Einstein condensed atoms.* Physical Review Letters, 78:582, 1997.
- [17] FEDICHEV, P.O. und U.R. FISCHER: *Gibbons-Hawking Effect in the Sonic de Sitter Space-Time of an Expanding Bose-Einstein-Condensed Gas.* Physical review letters, 91:240407, 2003.
- [18] SILVERMAN, M.P. und R.L. MALLET: *Dark Matter as a Cosmic Bose-Einstein Condensate and Possible Superfluid.* General Relativity and Gravitation, 34:633, 2002.
- [19] STAMPER-KURN, D.M., M.R. ANDREWS, A.P. CHIKKATUR, S. INOUE, H.J. MIESNER, J. STENGER und W. KETTERLE: *Optical confinement of a Bose-Einstein condensate.* Physical Review Letters, 80:2027–, 1998.
- [20] JOCHIM, S., M. BARTENSTEIN, A. ALTMAYER, G. HENDL, S. RIEDL, C. CHIN, J. HECKER DENSCHLAG und R. GRIMM: *Bose-Einstein condensation of molecules.* Science, 302:2101, 2003.
- [21] LIFSCHITZ, E.M. und L.P. PITAEVSKII: *Lehrbuch der theoretischen Physik IX. Statistische Physik. Teil 2.* Akademie-Verlag Berlin, 1979.
- [22] DANZL, J.G., E. HALLER, M. GUSTAVSSON, M.J. MARK, R. HART, N. BOULOUFA, O. DULIEU, H. RITSCH und H.C. NAGERL: *Quantum gas of deeply bound ground state molecules.* Science, 321:1062, 2008.
- [23] LANDAU, L.D. und V.L. GINZBURG: *On The Theory Of Superconductivity.* In: *Collected Papers of L.D. Landau.* Gordon and Breach, Science Publisher - Pergamon Press, 1965.

- [24] GROSS, E.P.: *Structure of a quantized vortex in boson systems*. Il Nuovo Cimento (1955-1965), 20:454, 1961.
- [25] PITAEVSKII, L.P.: *Vortex lines in an imperfect Bose gas*. Sov. Phys. JETP, 13:451, 1961.
- [26] CHANG, M.S., C.D. HAMLEY, M.D. BARRETT, J.A. SAUER, K.M. FORTIER, W. ZHANG, L. YOU und M.S. CHAPMAN: *Observation of Spinor Dynamics in Optically Trapped ^{87}Rb Bose-Einstein Condensates*. Physical review letters, 92:140403, 2004.
- [27] SCHMALJOHANN, H., M. ERHARD, J. KRONJÄGER, M. KOTTKE, S. VAN STAA, L. CACCIAPUOTI, J.J. ARLT, K. BONGS und K. SENGSTOCK: *Dynamics of $F=2$ spinor Bose-Einstein condensates*. Physical review letters, 92:40402, 2004.
- [28] SANTOS, L. und T. PFAU: *Spin-3 chromium bose-einstein condensates*. Physical review letters, 96:190404, 2006.
- [29] OHMI, T. und K. MACHIDA: *Bose-Einstein Condensation with Internal Degrees of Freedom in Alkali Atom Gases*. Journal of the Physical Society of Japan, 67:1822, 1998.
- [30] HO, T.-L.: *Spinor Bose Condensates in Optical Traps*. Phys. Rev. Lett., 81:742, 1998.
- [31] ZAMBELLI, F., L. PITAEVSKII, D.M. STAMPER-KURN und S. STRINGARI: *Dynamic structure factor and momentum distribution of a trapped Bose gas*. Physical Review A, 61:63608, 2000.
- [32] BAERWINKEL, K.: *Dynamic structure factor of ideal quantum systems*. Phys. kondens. Materie, 12:287, 1971.
- [33] BOSSE, J. und T. SCHLIETER: *Density excitations of weakly interacting Bose gas*. In: JANKE, W. und A. PELSTER (Herausgeber): *Proceedings of the 9th International Conference Path Integrals - New Trends and Perspectives, Sep. 23-28, 2007*. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2008.
- [34] BOSSE, J., K.N. PATHAK und G.S. SINGH: *Dynamics of uniform quantum gases, I: Density and current correlations*. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 389:408, 2010.
- [35] KOZUMA, M., L. DENG, E.W. HAGLEY, J. WEN, R. LUTWAK, K. HELMERSON, S.L. ROLSTON und W.D. PHILLIPS: *Coherent splitting of Bose-Einstein condensed atoms with optically induced Bragg diffraction*. Physical review letters, 82:871, 1999.

- [36] STENGER, J., S. INOUE, A.P. CHIKKATUR, D.M. STAMPER-KURN, D.E. PRITCHARD und W. KETTERLE: *Bragg spectroscopy of a Bose-Einstein condensate*. Physical Review Letters, 82:4569, 1999.
- [37] STAMPER-KURN, D.M., A.P. CHIKKATUR, A. GÖRLITZ, S. INOUE, S. GUPTA, D.E. PRITCHARD und W. KETTERLE: *Excitation of phonons in a Bose-Einstein condensate by light scattering*. Physical Review Letters, 83:2876, 1999.
- [38] STEINHAEUER, J., N. KATZ, R. OZERI, N. DAVIDSON, C. TOZZO und F. DALFOVO: *Bragg spectroscopy of the multibranch Bogoliubov spectrum of elongated Bose-Einstein condensates*. Physical review letters, 90:60404, 2003.
- [39] ERNST, P.T., S. GÖTZE, J.S. KRAUSER, K. PYKA, D.S. LÜHMANN, D. PFANNKUCHE und K. SENGSTOCK: *Probing superfluids in optical lattices by momentum-resolved Bragg spectroscopy*. Nature Physics, 6:56, 2010.
- [40] FERMI, E. und L. MARSHALL: *Interference phenomena of slow neutrons*. Physical Review, 71:666, 1947.
- [41] MARTIN, P.J., B.G. OLDAKER, A.H. MIKLICH und D.E. PRITCHARD: *Bragg scattering of atoms from a standing light wave*. Physical Review Letters, 60:515, 1988.
- [42] BERMAN, P.R. und B. BIAN: *Pump-probe spectroscopy approach to Bragg scattering*. Physical Review A, 55:438, 1997.
- [43] STAMPER-KURN, D.M. und W. KETTERLE: *Spinor Condensates and Light Scattering from Bose-Einstein Condensates (Proc. Les Houches 1999 Summer School, Session LXXII)*, 1999.
- [44] BLAKIE, P.B., R.J. BALLAGH und C.W. GARDINER: *Theory of coherent Bragg spectroscopy of a trapped Bose-Einstein condensate*. Physical Review A, 65:33602, 2002.
- [45] YI, S., Ö.E. MÜSTECAPLIOGLU, C.P. SUN und L. YOU: *Single-mode approximation in a spinor-1 atomic condensate*. Physical Review A, 66:11601, 2002.
- [46] ISOSHIMA, T., T. OHMI und K. MACHIDA: *Double phase transitions in magnetized spinor Bose-Einstein condensation*. Journal-Physical Society of Japan, 69:3864, 2000.
- [47] ZHANG, W., S. YI und L. YOU: *Bose-Einstein condensation of trapped interacting spin-1 atoms*. Physical Review A, 70:43611, 2004.
- [48] KAO, Y.M. und T.F. JIANG: *Transition temperatures of the trapped ideal spinor Bose gas*. The European Physical Journal D, 40:263, 2006.

- [49] PARVIS, S.-P.: *Thermodynamic Properties of $F = 1$ Spinor Bose-Einstein Condensates*. Diplomarbeit, Freie Universität Berlin, Internet: <http://users.physik.fu-berlin.de/pelster/Theses/soltan.pdf>, 2006. 138 pages.
- [50] ROBINSON, J.E.: *Note on the Bose-Einstein integral functions*. Physical Review, 83:678, 1951.
- [51] HAWKING, S. UND KOPERNIKUS, N. UND GALILEI G. UND KEPLER J. UND NEWTON I. UND EINSTEIN A.: *Die Klassiker der Physik*. Hoffmann und Campe, 2004. Sir Isaac Newton: Drittes Buch - Vom Weltensystem: Regeln zur Erforschung der Natur S.835 ff.
- [52] SCHWABL, F.: *Statistische Mechanik*. Springer-Verlag, 1. Auflage, 2006.
- [53] BOSSE, J., K.N. PATHAK und G.S. SINGH: *Dynamics of Uniform Quantum Gases II: Magnetic Susceptibility*. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 389:1173, 2010.
- [54] NOLTING, W.: *Grundkurs Theoretische Physik 7. Vielteilchentheorie*. Springer-Verlag, 6. Auflage, 2005.
- [55] FORSTER, D.: *Hydrodynamic Fluctuations, Broken Symmetry, and Correlation Functions*. W.A. Benjamin, Inc., 1975.
- [56] BOSSE, J. und K.N. PATHAK: *Manuscript: An approach to Many-Particle Physics by operator methods*. 2006.
- [57] LANDAU, L.: *Theory of the superfluidity of helium II*. Physical Review, 60:356, 1941.
- [58] PINES, D.: *The Theory Of Quantum Liquids*. Perseus Books, 1999.
- [59] BALIAN, R. und C. DE DOMINICIS: *Statistical quasiparticles, effective green's functions, and Landau descriptions of quantum liquids I. Impurity Systems at Equilibrium*. Annals of Physics, 62:229, 1971.
- [60] JOSEPHSON, B.D.: *Relation between the superfluid density and order parameter for superfluid He near T_c* . Physics Letters, 21:608, 1966.
- [61] YUKALOV, V.I. und A.S. SHUMOVSKY: *Lectures on phase transitions*. World Scientific Pub Co Inc, 1990.
- [62] SCHLIETER, T.: *Dynamischer Strukturfaktor von Quantengasen*. Diplomarbeit, Freie Universität Berlin, 2007.
- [63] WOOD, D.: *The Computation of Polylogarithms*. Technischer Bericht, University of

Kent, Computing Laboratory, University of Kent, Canterbury, UK, June 1992.

- [64] PELSTER, A.: *Bose-Einstein-Kondensation. Manuskript zur Vorlesung im SS 2004.* <http://users.physik.fu-berlin.de/pelster/manuscripts.html>, 2004.
- [65] BOGOLIUBOV, N.N.: *On the theory of superfluidity.* J. Phys.(USSR), 11:4, 1947.
- [66] FETTER, A. und J.D. WALECKA: *Quantum Theory of Many-Particle Systems.* Dover Publications, Inc. Mineola, 2005.
- [67] ABRIKOSOV, A.A., L.P. GORKOV und DZYLALOSHINSKI: *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics.* Dover Publications, Inc. Mineola, 1975.
- [68] MANSKE, D.: *Manuskript: Elementare Anregungen in Festkörpern: Grundlagen und Anwendungen.* 2008.
- [69] OHLINGER, M.: *Thermodynamic Properties of Spinor Bosons in Optical Lattices.* Diplomarbeit, Freie Universität Berlin, 2008.
- [70] LANDAU, L.D. und E.M. LIFSCHITZ: *Lehrbuch der theoretischen Physik V. Statistische Physik.* Akademie-Verlag Berlin, 1966.
- [71] COMPTON, A.H.: *A quantum theory of the scattering of x-rays by light elements.* Physical Review, 21:483, 1923.
- [72] REBHAN, E.: *Theoretische Physik II: Quantenmechanik, Quantenfeldtheorie, Elementarteilchentheorie, Thermodynamik und Statistik.* Spektrum Akademischer Verlag, 1. Auflage, 2005.

Danksagung

Herr Prof. Dr. Jürgen Bosse ermöglichte mir die Abfassung dieser Arbeit. Durch seine Hinweise, Fragen und seine Einstellung zur Physik erfuhr diese Arbeit mannigfache Prägung. Ich danke verbindlich für Anteilnahme und Diskussion in gewinnender Atmosphäre. Auch möchte ich den großzügigen Umgang mit seinen Erfahrungsschätzen gelobt sein wissen und dafür danken, dass er mir ein moralisches Vorbild als Wissenschaftler war.

Großen Dank möchte ich Herrn Priv.- Doz. Dr. Axel Pelster bekunden, für die Vermittlung einer selbstständig, optimistischen Arbeitsweise und dafür, dass er mich in das Thema eingeführt hat. Seinen Einsichten in die Physik der BEKe sind entscheidende Hinweise zu verdanken, die Einzug ins Fundament dieser Arbeit gefunden haben. Ich danke für all die bereichernden Diskussionen.

Janne Callsen, Victor Kempf und Herbert Liebchen danke ich für sprachliche Korrekturen.

Liebstes Dankgefühl gilt meinen Eltern, dafür, dass sie mir das Studium ermöglichten und für mich da waren, als ich sie in einer schwierigen Zwischenzeit wirklich brauchte.