

Ultrakalte Atomgase in Zufallspotentialen

Diplomarbeit

zur Erlangung des Grades

Diplom-Physiker

von

Matthias Timmer

aus Dorsten



vorgelegt dem
Fachbereich Physik der
Universität Duisburg Essen
am 31. Mai 2006

Ich versichere, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig und nur unter Zuhilfenahme der angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe.

Essen, 31.05.06

Hauptgutachter: Prof. Dr. Dr. h.c. Robert Graham

Zweitgutachter: Priv.-Doz. Dr. Axel Pelster

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	9
2	Modell ungeordneter Bosonen	17
2.1	Unordnung	17
2.2	Replika-Methode	19
3	Feynmansche Störungstheorie für T_c	23
3.1	Überblick	23
3.2	Greensche Funktion des ungestörten Systems	23
3.3	Feynman-Diagramme	24
3.4	Nullte Ordnung	26
3.4.1	Freies Bose-Gas	28
3.4.2	Anisotrope harmonische Falle	28
3.5	Erste Ordnung	29
3.5.1	Gauß-Korrelation	31
3.5.2	Lorentz-Korrelation	32
3.6	Selbstenergie und renormiertes chemisches Potential	33
3.6.1	Definition der Selbstenergie und des renormierten chemischen Potentials	34
3.6.2	Störungsreihe für die Greensche Funktion	36
3.6.3	Berechnung des renormierten chemischen Potentials	37
3.6.4	Gauß-Korrelation	38
3.6.5	Lorentz-Korrelation	39
3.7	Verschiebung der kritischen Temperatur	40
3.7.1	Freies Bose-Gas	40
3.7.2	Anisotrope harmonische Falle	48
4	Herleitung der Hartree-Fock-Bogoliubov-Gleichungen	55

4.1	Wirkung	55
4.2	Gross-Pitaevskii-Gleichung und Teilchendichte	60
4.3	Korrelationen	63
4.3.1	Normale Korrelation	66
4.3.2	Anormale Korrelationen	67
4.4	Spezialisierung auf den Fall unkorrelierten R und lokalen U	67
4.5	Probleme der Hartree-Fock-Bogoliubov Näherung	69
4.5.1	Fehlende Bandlückenfreiheit der Dispersion	69
4.5.2	Lösungsvorschläge	70
5	Näherungsweise Lösung der Hartree-Fock-Bogoliubov-Gleichungen	73
5.1	R nichtlokal ortsabhängig	73
5.2	Schnell abfallende R und U	74
5.3	Effektives Potential	76
5.4	Popov-Theorie ohne Unordnung	78
5.4.1	Stabiler und instabiler Zweig in der Kondensatphase	83
5.4.2	Stelle des Phasenübergangs	84
5.4.3	Superfluide Dichte	84
5.5	Huang-Meng-Ergebnis für die Entleerung des Grundzustandes	85
5.6	Erweiterung des Huang-Meng-Resultats	87
5.7	Notwendige Näherungen und Entwicklungen	88
5.7.1	T-Matrix	89
5.7.2	Hochtemperaturlimes	89
5.7.3	Tieftemperaturlimes	90
5.7.4	Theorie für $T=0$ und sehr schwache Wechselwirkung	91
5.8	Superfluide Dichte	92
5.8.1	Näherung in Analogie zur T-Matrix	98
5.8.2	Superfluide Dichte in Popov-Näherung ohne Unordnung	99
5.9	Gasphase und Unordnungsphase	100
5.10	Theorie für $T=0$ bei sehr schwacher Wechselwirkung	101
5.10.1	Bandlückenfreies Spektrum	103
5.10.2	Konservierender Fall: Erhaltung von Teilchenzahl, Impuls und Energie	106
5.10.3	Interpretation	112

6 Zusammenfassung und Ausblick	115
6.1 Zusammenfassung der Ergebnisse	115
6.2 Ausblick	117
7 Danksagung	119
A Poisson-Formel	121
B Robinson-Formel	123
C Isotherme Kompressibilität	125
D Dimensionale Regularisierung	127
E Modifizierte Version der dimensionalen Regularisierung	129
F Berechnung der Determinanten einer großen Matrix	131
Literaturverzeichnis	133

Abbildungsverzeichnis

1.1	Zufallspotential für "speckles": Versuchsaufbau und Stärke	11
1.2	Zufallspotential für "speckles": Messungen	12
1.3	Funktionsprinzip einer Drahtfalle	13
1.4	Typische Abweichungen von einem idealen Fallenpotential	14
3.1	Freies Bose-Gas: Kritische Temperatur gegen Korrelationslänge bei Gaußkorrelation	43
3.2	Freies Bose-Gas: Verschiebung der kritischen Temperatur gegen Teilchendichte bei Gaußkorrelation	44
3.3	Freies Bose-Gas: Kritische Temperatur gegen Korrelationslänge bei Lorentz-Korrelation	47
3.4	Freies Bose-Gas: Kritische Temperatur gegen Korrelationslänge, Vergleich der Korrelationen . . .	48
3.5	Bose-Gas in harmonischer Falle: Kritische Temperatur gegen Korrelationslänge bei Gauß-Korrelation	50
3.6	Bose-Gas in harmonischer Falle: Verschiebung der kritischen Temperatur gegen Teilchenzahl bei Gaußkorrelation	51
3.7	Bose-Gas in harmonischer Falle: Kritische Temperatur gegen Korrelationslänge bei Lorentz-Korrelation	53
3.8	Bose-Gas in harmonischer Falle: Kritische Temperatur gegen Korrelationslänge, Vergleich der Korrelationen	54
5.1	Popov-Näherung: Kondensatdichte für Rubidium-87 gegen die Temperatur	83
5.2	Popov-Näherung: Teilchendichte gegen chemisches Potential	84
5.3	Popov-Näherung: Superfluide Dichte und Kondensatdichte für Rubidium-87 gegen die Temperatur	100
5.4	$T = 0$: Kondensatdichte gegen Unordnung	105
5.5	$T = 0$: Superfluide Dichte gegen Unordnung bei Annahme eines bandlückenfreien Spektrums . .	106
5.6	$T = 0$: Kondensatdichte und superfluide Dichte gegen Unordnung bei Annahme eines bandlückenfreien Spektrums	106
5.7	$T = 0$: Teilchendichte gegen chemisches Potential bei Annahme eines bandlückenfreien Spektrums	107
5.8	$T = 0$: Thermodynamisches Potential gegen Kondensatdichte im konservierenden Fall	108
5.9	$T = 0$: Superfluide Dichte gegen Unordnung im konservierenden Fall	109
5.10	$T = 0$: Kondensatdichte und superfluide Dichte gegen Unordnung im konservierenden Fall	110

5.11 $T = 0$: Teilchendichte gegen chemisches Potential im konservierenden Fall	111
5.12 $T = 0$: Mögliche superfluide Dichten im konservierenden Fall	112

Kapitel 1

Einleitung

Physikalische Motivation

Nach der experimentellen Realisierung von Bose-Einstein-Kondensaten im Jahre 1995 [1,2] hat die Theorie ultrakalter Atomgase in jüngerer Zeit einen enormen Interessenzuwachs zu verzeichnen. Eine Einführung in das Thema bieten die Bücher von Pitaevskii und Stringari [3] und von Pethick und Smith [4]. Einen Überblick über die bisher erhaltenen Ergebnisse bieten auch Andersen [5] und Dalfovo, Giorgini, Pitaevskii und Stringari [6] in ihren Übersichtsartikeln.

Die bisherige experimentelle Realisierung der Bose-Einstein-Kondensate geschah stets durch ideale Fallen, meist Magneto-Optische Fallen, die ein ideales harmonisches Potential zur Verfügung stellten. Darauf bezog sich auch der Großteil der bisherigen theoretischen Arbeiten.

Durch Überlagerung eines idealen harmonischem Fallenpotentials mit einem zufälligen "speckle"-Feld, d.h. einem Zufallspotential, kann man dieses Ideal jedoch künstlich zerstören [7]. Die Methode benutzt einen ungeordneten Streuer, z.B. einen Festkörper, durch den ein Laserstrahl gelenkt wird. Daraus ergibt sich ein zufälliges Interferenzmuster, welches folglich ungeordnet ist. Ein Zufallspotential führt also zu Unordnung. Die Stärke des Zufallspotentials kann im Prinzip durch die Intensität des gestreuten Lasers festgelegt werden. Einen typischen Versuchsaufbau beschreiben Inguscio *et al* in einer Arbeit [8]. Der dort gezeigte Versuchsaufbau ist in Abbildung 1.1 wiedergegeben. Demnach befindet sich ein ^{85}Rb -Kondensat aus etwa $N = 3 \times 10^5$ Atomen in einer Kammer in einer harmonischen Magnetfalle mit axialer Fallenfrequenz $\omega_z = 2\pi \times 8,74$ Hz und radialen Fallenfrequenzen $\omega_{\perp} = 2\pi \times 85$ Hz. Sie ist also zigarrenförmig. Das Kondensat hat dann eine Ausdehnung von 11 nm in radialer Richtung und von 110 nm in axialer Richtung. Die maximale Dichte in der Falle beträgt $n = 1,2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$. Ein Laser der Wellenlänge $\lambda = 822$ nm wird durch eine diffusive Platte gelenkt, was zu einem zufälligen Interferenzmuster führt. Dieses Muster wird mit Hilfe eines Spiegelsystems in die Kondensatkammer gelenkt. Direkt vor der Kammer geschieht dies durch einen dichroitischen Spiegel, der Wellenlängen $\lambda > 800$ nm reflektiert und Wellenlängen $\lambda < 800$ nm transmittiert. Hinter der Kammer wird das "speckle"-Potential mit einer CCD-Kamera aufgenommen. Die nächstgelegene Spektrallinie für Rubidium liegt bei $\lambda = 795$ nm, d.h. der Laser ist stark gegen diese Spektrallinie verstimmt. Um Aufnahmen des Kondensats zu machen, wird zunächst das gesamte Fallenpotential, inklusive Zufallspotential, ausgeschaltet. Nach einer Wartezeit von 28 ms wird ein Laser der Wellenlänge $\lambda = 795$ nm durch den dichroitischen Spiegel in die Kammer gelenkt, und hinter der Kammer wird das Absorptionsprofil gemessen, woraus man Rückschlüsse auf die Dichteverteilung in der Falle zieht.

Das "speckle"-Potential wird hierbei jeweils adiabatisch verändert. Die Stärke des Zufallspotentials wird in der Arbeit dadurch definiert, dass sie die doppelte Standardabweichung des Potentials über 200 nm in axialer Rich-

tung ausmessen. Diese Stärke wird in Einheiten der Frequenz angegeben, wobei das chemische Potential μ eine Stärke von etwa 1 kHz hat. Abbildung 1.2 zeigt nun einige Messergebnisse. Im Teil (a) der Abbildung wird das Dichteprofil des Kondensats für verschiedene Stärken des Zufallspotentials gezeigt. Für sehr schwaches Zufallspotential (50 Hz) ändert sich das Dichteprofil gegenüber dem geordneten Fall ohne Unordnung praktisch nicht. Für ein mittleres Zufallspotential (360 Hz) sieht man, dass verschiedene fragmentierte Kondensate entstehen, also lokalisierte Kondensate, die untereinander keine Kohärenz mehr aufweisen. Für sehr großes Zufallspotential (1200 Hz) verschwindet die Kondensatdichte, und man erhält nur noch eine thermische Dichteverteilung.

Dass dieser Effekt tatsächlich auf die Unordnung zurückzuführen ist, zeigt die Gruppe mittels Teil (b) der Messergebnisse in Abbildung 1.2. Das erste Bild zeigt das Dichteprofil des Kondensats, ohne dass jemals ein "speckle"-Potential hinzugeschaltet worden ist. Das zweite Bild zeigt das Dichteprofil nach adiabatischem Anstieg des Zufallspotentials. Das dritte Bild hingegen zeigt das Dichteprofil nach adiabatischem Anstieg und dann wieder adiabatischem Absenken des Zufallspotentials. Offenbar sehen sich das erste und das letzte Bild sehr ähnlich. Damit ist gezeigt, dass das Verschwinden des Kondensats tatsächlich auf einen Effekt der Unordnung zurückzuführen ist, der die Temperatur des Systems nicht ändert.

Teil (c) der Abbildung 1.2 zeigt nun die induzierten Dipolschwingungen, nachdem die Falle abrupt um $25 \mu\text{m}$ bewegt worden ist. Falls es keine Unordnung gibt, so sind die Schwingungen auf der betrachteten Zeitskala praktisch nicht gedämpft, während es bei größerer Unordnung zu immer stärkerer Dämpfung kommt. Dies geht offenbar damit einher, dass das Kondensat nicht mehr superfluid ist.

Weitere Experimente mit "speckles" hat auch die Gruppe um A. Aspect durchgeführt [9]. Außerdem gibt es auch Arbeiten zu Bose-Einstein-Kondensaten im Gitter, die von der Gruppe um W. Ertmer durchgeführt wurden [10]. Die Behandlung von Bose-Einstein-Kondensaten im Gitter wird jedoch nicht Gegenstand dieser Arbeit sein.

Die Korrelationslänge des entstehenden Zufallspotentials ist durch das Streumaterial festgelegt. Eine wesentliche Limitierung der Methode besteht darin, dass es sehr schwierig ist, eine Korrelationslänge kleiner als einige μm zu bekommen [11].

Die Unordnung, welche man erhält, wenn man ein "speckle"-Potential erzeugt, wurde künstlich eingeführt: Es wurde ein zusätzliches Potential dem idealen Fallenpotential überlagert. Die Falle selbst wurde immer noch als ideal angenommen. Im Rahmen erster Versuche mit magnetischen Drahtfallen, die das Grundgerüst eines so genannten Atomchips sind, wurde jedoch festgestellt, dass diese Annahme nicht mehr aufrecht erhalten werden kann [12–14]. Statt dessen kommt es bei diesen Atomchips zu kleinen Abweichungen des physikalisch realisierten Fallenpotentials von einem idealen Fallenpotential. Um dies zu verstehen, soll zunächst erläutert werden, wie diese Drahtfallen funktionieren. Hierzu dient Abbildung 1.3, die aus einer Arbeit von Schmiedmayer *et al* entnommen wurde [15]. Demnach führt ein durch einen Draht fließender Strom I_w zu einem Magnetfeld. Überlagert man dieses Magnetfeld mit einem zusätzlich von außen quer angelegten Magnetfeld \mathbf{B}_b , so erhält man in einem bestimmten Abstand vom Draht ein Minimum dieses Magnetfeldes, und damit eine magnetische Falle.

Die Gruppe um Schmiedmayer hat nun die Schwankungen des Magnetfeldes an diesem Minimum entlang des Drahtes untersucht [14]. Sie betrachteten dazu einen Draht der Breite $100 \mu\text{m}$, und setzten fest, dass das Minimum bei einem Abstand $d = 10 \mu\text{m}$ sein sollte. Dazu schickten sie verschieden starke Ströme durch den Draht, und legten dazu passend verschiedene magnetische Querfelder an. Die Beobachtung war nun, dass es bei allen Stromstärken zu Schwankungen des Magnetfeldes kam. Die Ergebnisse sind in Abbildung 1.4 zu sehen. Dabei entspricht die gepunktete Linie einem Querfeld von 10 G (Gauß, $1 \text{ G} = 10^{-4} \text{ T}$), die durchgezogene Linie einem Querfeld von 20 G und die gestrichelte Linie einem Querfeld von 30 G. Demnach waren die normierten Schwankungen des Magnetfeldes $\Delta B/B$ bis zu 2×10^{-4} groß. Sie sind also sehr klein. Dennoch kann nicht mehr vom theoretischen Modell einer idealen Falle ausgegangen werden. Klein in der Abbildung zu sehen ist noch die Verteilung der Schwankungen dieser Kurven. Die Breite $\sigma = 8 \times 10^{-6}$ dieser Verteilung für unterschiedliche

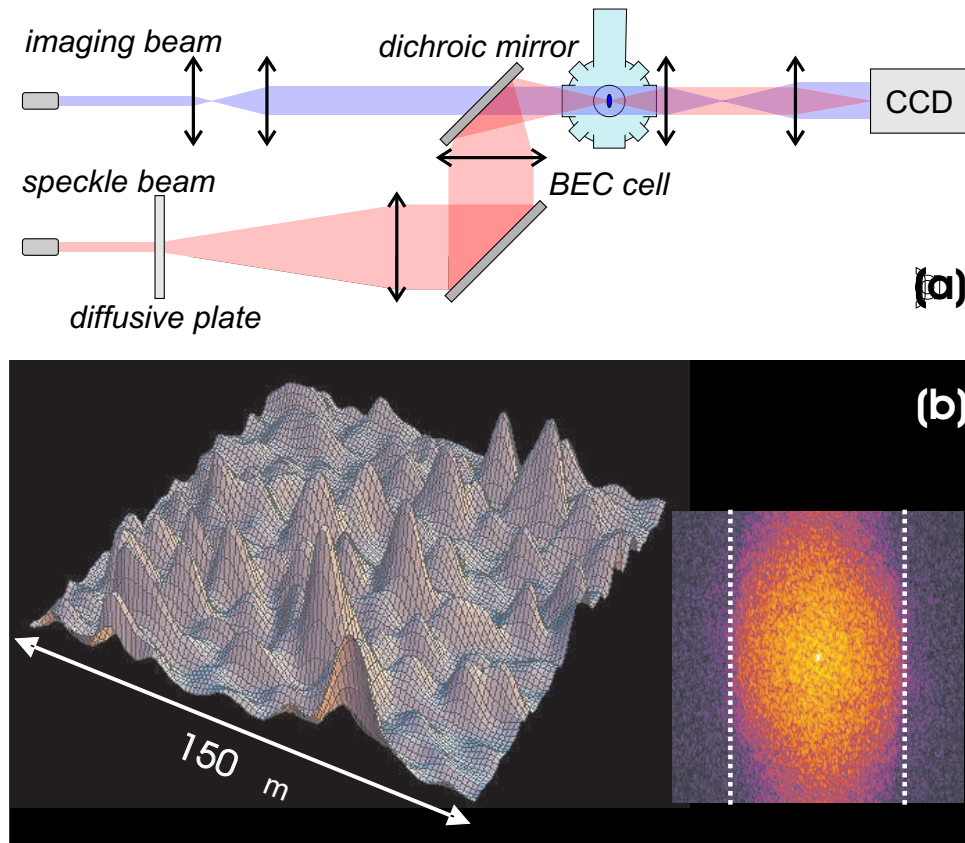


Abbildung 1.1: Erzeugung eines typischen Zufallspotentials mittels "speckles" und Messung von dessen Stärke. In ist der Versuchsaufbau (a) zu sehen. Demnach wird ein Laserstrahl durch eine diffusive Platte gelenkt, was zu einem zufälligen Interferenzmuster in der Falle führt, welche sich in der Kammer hinter dem dichroitischen Spiegel befindet. Das untere Bild (b) ist eine Messung der Stärke des Zufallspotentials. Die Größe der Schwankungen ist im Vergleich zur Stärke eines typischen Fallenpotentials sehr klein. Das kleine Bild in (b) stellt die Fouriertransformierte des Zufallspotentials dar.

Stromstärken ist etwa genau so groß wie die Schuss-zu-Schuss-Variationen verschiedener Realisierungen des Experiments bei gleichen Stromstärken. Das bedeutet, dass es keine stromunabhängigen Beiträge zur Unordnung, wie etwa elektrostatische Effekte, gibt.

Der Grund für die Schwankungen des Magnetfeldes liegt in stets vorhandenen Unreinheiten und Fertigungsfehlern der Drähte. Dies führt zu Variationen des Magnetfeldes, welche an einem Ort eingefroren sind. Es handelt sich also um eine natürliche Unordnung. Auf Atomchips ist das Zufallspotential lorentz-korreliert, im \mathbf{k} -Raum ist $R(\mathbf{k}) = R/(1 + \xi^2 \mathbf{k}^2)$ [12]. Eine typische Korrelationslänge ξ ist hierbei beispielsweise $5 \mu\text{m}$, während die so genannte "healing length" ξ_h lediglich $0,1 \mu\text{m}$ groß ist [9]. Die Definition und physikalische Bedeutung der "healing length" kann in dem Buch von Pitaevskii und Stringari [3, (Kapitel 5)] nachgelesen werden. Im wesentlichen besagt sie, über welche Distanzen sich Störungen des Kondensats bemerkbar machen.

Eine theoretische Vereinfachung der Korrelationsfunktion des Zufallspotentials besteht oft darin, es als unkorreliert anzunehmen, was gleichbedeutend ist mit dem Verschwinden der Korrelationslänge: $\xi = 0$. Der Hauptgrund für diese Vereinfachung besteht darin, dass die Gleichungen damit leichter behandelbar sind. Damit das Verhältnis zwischen der Korrelationslänge des Unordnungspotentials und der "healing length" grenzwertig dennoch nicht vollkommen anders ist, muss die "healing length" sehr groß werden, insbesondere sehr groß gegen die Korrelationslänge des Zufallspotentials, was äquivalent ist zu sehr schwacher Wechselwirkung. Viele bisher realisierten

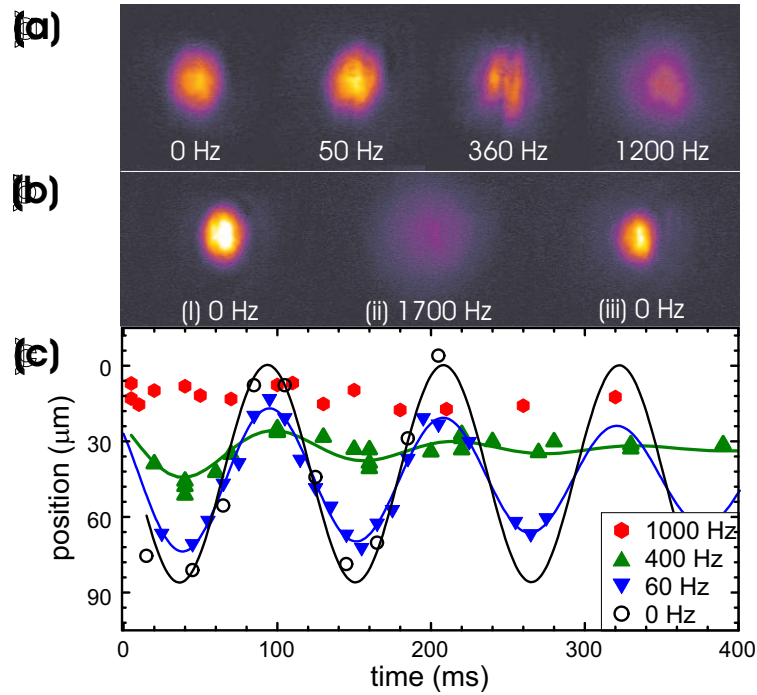


Abbildung 1.2: Messungen in einer harmonischen Falle mit überlagertem "speckle"-Zufallspotential: (a) Dichteprofil des Bose-Kondensats nach 28 ms Expansion mit ausgeschalteter Falle und Zufallspotential mit unterschiedlichen Stärken des Zufallspotentials, die im unteren Teil vermerkt sind. Um zu zeigen, dass der Transfer zum "speckle"-Feld adiabatisch ist, zeigt (b) das Dichteprofil (i) ohne "speckle"-Potential, (ii) wenn das "speckle"-Potential abrupt ausgeschaltet wird, und (iii) wenn es adiabatisch heruntergefahren wird. (c) Dipolschwingungen im kombinierten Potential für verschiedene Stärken der Unordnung.

Zufallspotentiale lassen sich also damit nur unvollkommen modellieren.

Ein bisher noch nicht realisiertes Modell für Unordnung wird von Astrakharchik, Boronat, Casulleras und Giorgini vorgestellt [16]. Dabei werden einzelne Atome zufällig in den Minima eines Potentials platziert. Diese Atome sind dann Streuzentren. Auch dies führt zu Unordnung. Die Stärke R dieser Unordnung hängt dann vor allem von der Dichte der Streuzentren n_{imp} , d.h. der Atome, und deren durchschnittlichem Durchmesser a_{imp} ab, und zwar mittels $R \propto a_{\text{imp}}^2 n_{\text{imp}}$.

Eine dritte Möglichkeit, Unordnung zu erzeugen, besteht darin, ein Gitter mit einem zweiten Gitter mit stark unterschiedlicher und unkomensurabler Wellenlänge zu überlagern, einem System, welches als nicht kommensurables Gitter bekannt ist. Erste Ergebnisse liefern die Experimente aus der Gruppe von Inguscio [11]. Diese Methode scheint vielversprechend zu sein, um große Unordnung realisieren zu können. Es ist allerdings nicht klar, ob das entstehende Potential dann als Zufallspotential beschrieben werden kann.

Theoretischer Hintergrund

Zu den noch zu betrachtenden theoretischen Problemen dieser Systeme gehören die Auswirkungen von Unordnung auf deren Kondensatdichte und superfluide Dichte, insbesondere die Auswirkungen starker Unordnung. Die Auswirkungen von Unordnung wurden zum ersten Mal bei der Beobachtung von superfluidem Helium in Vycor beobachtet [17]. Vycor ist ein poröses Medium. Es wurde beobachtet, dass die Wärmekapazität des Systems einen Knick machte, wenn die superfluide Dichte verschwand. Dieser Phasenübergang wurde durch Temperaturänderung erzielt. Die Temperatur, bei der dies auftritt, hängt zusammen mit der Stärke der Unordnung, welche wiederum

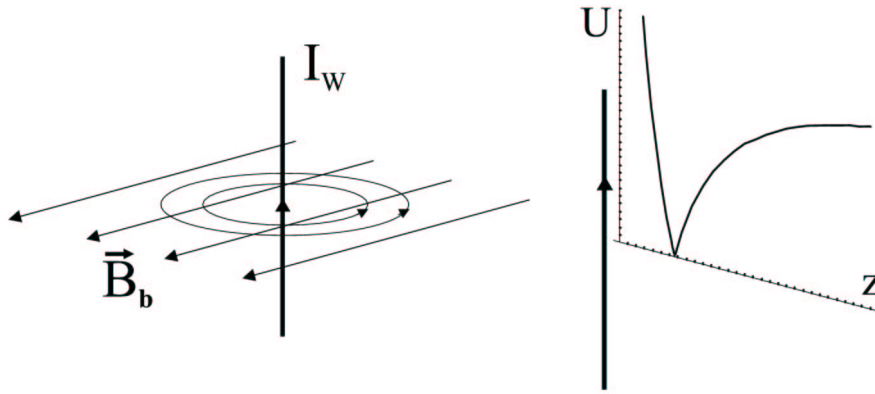


Abbildung 1.3: Funktionsweise einer Drahtfalle. Links: Ein Strom fließt durch einen Draht und erzeugt dadurch ein Magnetfeld. Durch ein gleichzeitig angelegtes magnetisches Querfeld \vec{B}_b bekommt man ein effektives Magnetfeld. Rechts: Das effektive Magnetfeld führt zu einem magnetischen Fallenpotential U , das vom radialen Abstand von der Oberfläche des Drahtes z abhängt, und in einem bestimmten Abstand ein Minimum besitzt.

mit der Porösität des Mediums zusammenhängt. Die Beobachtung dieses Phasenübergangs löste eine Reihe von theoretischen Arbeiten aus, welche die Molekularfeldtheorie in Bogoliubov-Näherung auf das Problem schwacher Unordnung erweiterten, wobei hier insbesondere die Arbeiten von Huang und Meng [18], von Giorgini, Pitaevskii und Stringari [19] und die von Lopatin und Vinokur [20] genannt werden sollen.

Huang und Meng betrachteten dabei als erste die Effekte eines schwachen, räumlich unkorrelierten Zufallspotentials, also die Effekte schwacher Unordnung. Sie sagten voraus, dass die superfluide Dichte des Systems bei $T = 0$ stets kleiner ist als dessen Kondensatdichte. Sie stellten außerdem fest, dass die superfluide Dichte völlig verschwinden kann, während die Kondensatdichte für endliche Unordnungsstärke stets erhalten bleibt. Die Unordnung führt bei ihnen also zu einem Phasenübergang, der dadurch gekennzeichnet ist, dass die superfluide Dichte verschwindet. Sie ist auf Grund des Verschwindens der superfluiden Dichte durch Lokalisierung gekennzeichnet. Diese Phase kann daher als Bose-Glas interpretiert werden, analog zum Spin-Glas in der Arbeit von Edwards und Anderson [21]. Giorgini, Pitaevskii und Stringari bestätigten dieses Ergebnis, und betrachteten zusätzlich die Schallgeschwindigkeit. Lopatin und Vinokur schließlich entwickelten in ihrer Arbeit eine diagrammatische Technik für das Problem des verdünnten wechselwirkenden Bose-Gases mit schwacher Unordnung bei endlichen Temperaturen [20]. Insbesondere benutzten sie in ihrer Arbeit die Replika-Methode, um das großkanonische Potential zu berechnen. Alle Arbeiten spezialisierten außerdem auf räumlich unkorrelierte Unordnung, was zumindest für bisher physikalisch realisierte Potentiale nicht zutrifft, wie sie z.B. von Inguscio *et al.* verwendet wurden [22]. Der Ansatz von Lopatin und Vinokur führt, neben den bekannten Resultaten aus den beiden erwähnten anderen Arbeiten, außerdem zur Bestimmung der Verschiebung der kritischen Temperatur durch die Unordnung in 1. Ordnung der Unordnungsstärke. Dies wurde in der Arbeit nur für das freie Bose-Gas gemacht. Alle drei Arbeiten konnten außerdem keine Aussagen für starke Unordnungspotentiale liefern. Dies wurde aber von Hertz, Fleishman und Anderson in ihrer Arbeit getan [23]. Sie fanden heraus, dass es für große Unordnung keine stabile Phase gebrochener Symmetrie geben kann. Dies würde darauf hinweisen, dass die Kondensatdichte ebenfalls für eine kritische Stärke der Unordnung verschwindet. Dies wird im Prinzip durch die Theorie von Nozieres und Saint James gestützt, die ein fragmentiertes Kondensat für große Unordnung vorhersagt, allerdings bei attraktiver Wechselwirkung [24]. Die Haupteigenschaft ist, dass es lokale Kondensate gibt, die keine Phasenkohärenz mit Kondensaten an anderen Orten aufweisen. Bei ihnen kann es zur Paarkondensation kommen, ohne dass es zur Ausbildung eines globalen Teilchenkondensats kommt.

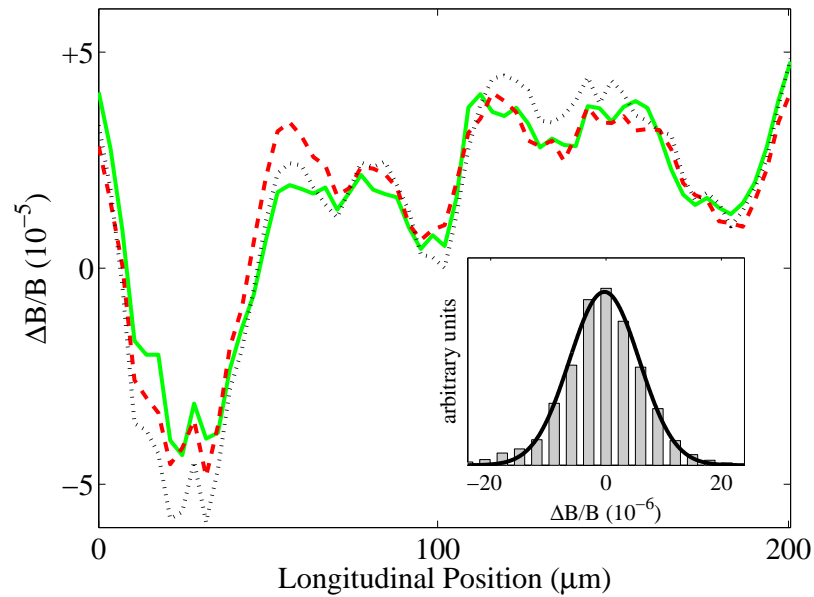


Abbildung 1.4: Potential entlang des Drahtes bei einem konstanten Abstand $d = 10 \mu\text{m}$ von der Oberfläche eines $100 \mu\text{m}$ breiten Drahtes. Die verschiedenen Kurven sind für verschiedene Ströme gemessen worden, und sind auf das jeweilige magnetische Querfeld normiert. Die magnetischen Querfelder (gepunktet: 10 G, durchgezogen: 20 G, gestrichelt: 30 G) wurden so gewählt, dass trotz verschiedener Stromstärken der Abstand des Potentialminimums von der Drahtoberfläche d konstant blieb. Der Einschub zeigt ein Histogramm der Schwankungen der Kurven. Die Breite dieser Verteilung ($\sigma = 8 \times 10^{-6}$) für unterschiedliche Stromstärken ist etwa genau so groß wie die Schuss-zu-Schuss-Variationen verschiedener Realisierungen des Experiments bei gleichen Stromstärken.

Zweck dieser Arbeit

Hiernach ist die Aufgabe, die innerhalb dieser Diplomarbeit behandelt werden soll, zweigeteilt.

Zum einen soll überprüft werden, in wie weit sich die Ergebnisse für die Verschiebung der kritischen Temperatur, die durch Lopatin und Vinokur vorgestellt wurden [20], verallgemeinern lassen. Hierbei ist es insbesondere interessant, endliche Korrelationslängen zu betrachten, und auch eine magnetische Falle einzubauen. Hierbei wurde eine anisotrope harmonische Falle angenommen. Die Ergebnisse finden sich in Kapitel 3.

Zum anderen soll untersucht werden, wie das Problem starker Unordnung im Rahmen einer Molekularfeldnäherung behandelt werden kann. Hierzu wird die Hartree-Fock-Bogoliubov-Näherung verwendet. Die Arbeit soll die Ergebnisse der Hartree-Fock-Näherung von A. Pelster und R. Graham erweitern und verbessern, die in [25] dargestellt wurden. Es soll außerdem überprüft werden, ob sich die Voraussagen der Theorie von Huang und Meng [18] reproduzieren lassen, oder ob sich Abweichungen ergeben. Insbesondere sollen die Kondensatdichte und die superfluide Dichte bestimmt werden. Außerdem soll überprüft werden, ob die Voraussage von Hertz, Fleishman und Anderson [23] bestätigt werden kann, dass die Kondensatdichte verschwindet. Die Herleitung der Gleichungen findet sich in Kapitel 4, die Auswertung folgt in Kapitel 5.

Kapitelübersicht

In Kapitel 2 wird das theoretische Modell erklärt, mit dem gearbeitet wird. Insbesondere wird zur Behandlung der Unordnung die Replika-Methode eingeführt und erläutert.

In Kapitel 3 wird dann eine Störungstheorie für die Verschiebung der kritischen Temperatur in einem ungeord-

neten Bose-Gas hergeleitet. Es wird dabei das freie Bose-Gas und das Bose-Gas in einer Falle betrachtet, und für die 2-Punkt Korrelationsfunktion des Zufallspotentials werden zum einen Gauß-Korrelation und zum anderen Lorentz-Korrelation angenommen.

Das nachfolgende Kapitel 4 ist in dieser Arbeit vollkommen unabhängig von Kapitel 3. Es wird eine Faktorisierungsmethode, welche als Hartree-Fock-Bogoliubov-Näherung bekannt ist, auf ungeordnete Systeme angewendet. Dabei wird auf die Behandlung einer Falle verzichtet. Die dann entstehenden Molekularfeldgleichungen für ein beliebiges Zufallspotential werden in diesem Kapitel hergeleitet, und es wird auf den Spezialfall eines unkorrelierten Potentials eingegangen.

Schließlich werden die in Kapitel 4 hergeleiteten Gleichungen in Kapitel 5 in verschiedenen Spezialfällen behandelt. Zunächst werden verschiedene Spezialfälle betrachtet, und deren Auswirkungen auf die Molekularfeldgleichungen behandelt. Darauf folgend wird untersucht, ob sich bekannte Ergebnisse reproduzieren lassen, und ggf. wo sich Abweichungen von bekannten Ergebnissen ergeben. Dies führt auf diverse Probleme bei der Behandlung der Gleichungen, sodass verschiedene Näherungen vorgeschlagen werden, mit denen sich diese Probleme behandeln lassen. Ebenfalls wird eine Gleichung für die superfluide Dichte hergeleitet. Schließlich wird der Fall $T = 0$ bei sehr schwacher Wechselwirkung behandelt, und insbesondere die Vorhersagen für den Fall großer Unordnung untersucht. Einer der Unterpunkte behandelt den Fall, dass man ein bandlückenfreies Spektrum fordert, ein anderer den Fall, dass man fordert, dass man eine energie- und teilchenzahlerhaltende Theorie hat.

Die Arbeit schließt mit einer Zusammenfassung der wesentlichen Ergebnisse, und einem nachfolgenden Ausblick. Dies geschieht in Kapitel 6.

Kapitel 2

Modell ungeordneter Bosonen

Im Rahmen eines Überblicks über die verwendeten Modelle bei der Behandlung von Zufallspotentialen legt dieses Kapitel einige wichtige Grundlagen. Zunächst ist zu beachten, dass Zufallspotentiale durch Unordnung modelliert werden. Diese Potentiale, welche auch als Unordnungspotentiale bezeichnet werden, werden mittels Funktionalintegralmethoden behandelt. Davon handelt dieses einführende Kapitel.

2.1 Unordnung

Es wird ein ungeordnetes, reelles, gaußverteiltes Potential $V(\mathbf{x})$ angenommen, für das folgende grundlegende Eigenschaften gültig sind:

$$\overline{V(\mathbf{x})} = 0, \quad (2.1)$$

$$\overline{V(\mathbf{x})V(\mathbf{x}')} = R(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (2.2)$$

Die Unordnungsmittelwerte sind translationsinvariant angenommen. R charakterisiert die Stärke der Unordnung. Folglich geschieht eine störungstheoretische Entwicklung der Unordnung im Folgenden stets für kleine R . Man beachte außerdem, dass im Folgenden stets angenommen wird, dass die Reihenfolge der Koordinaten in der Korrelation egal ist, d.h.

$$R(\mathbf{x}) = R(-\mathbf{x}). \quad (2.3)$$

Mit der Forderung nach räumlicher Isotropie folgt sogar

$$R(\mathbf{x}) = R(|\mathbf{x}|). \quad (2.4)$$

Der einfachste Fall ist der von räumlich unkorrelierter Unordnung,

$$R(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = R\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (2.5)$$

Man kann nun ein Funktionalintegralmaß wie folgt definieren:

$$1 = \int \mathcal{D}V \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int d^D x \int d^D x' R^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') V(\mathbf{x}) V(\mathbf{x}') \right\}. \quad (2.6)$$

Hierbei bezeichnet $d^D x$ das infinitesimale Volumenelement in D Dimensionen. Der Integralkern $R^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ wird durch die Gleichung

$$\int d^D x R^{-1}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}) R(\mathbf{x} - \mathbf{x}_2) = \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \quad (2.7)$$

definiert und ist demnach das funktionale Inverse der Unordnungskorrelation (2.2). Im Falle eines räumlich unkorrelierten Unordnungspotentials (2.5) erhält man

$$R^{-1}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) = \frac{1}{R} \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2). \quad (2.8)$$

Das Funktionalintegral wird hierbei als Produkt gewöhnlicher Integrale verstanden:

$$\int \mathcal{D}V = N \prod_{\mathbf{x}} \int_{-\infty}^{\infty} dV(\mathbf{x}), \quad (2.9)$$

wobei in diesem formalen Ausdruck die formal unendlich große Konstante N durch die Normierung festgelegt wird. Außerdem benötigt man noch die Definition der Unordnungsmittelwerte, welche durch die folgende Gleichung geschieht:

$$\overline{\bullet} = \int \mathcal{D}V \bullet \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int d^D x \int d^D x' R^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') V(\mathbf{x}) V(\mathbf{x}') \right\}. \quad (2.10)$$

Aus dem Funktionalintegralmaß (2.6) erhält man nach Einführung des Stromfeldes $j(\mathbf{x})$ ein erzeugendes Funktional durch die Definition

$$I[j] = \int \mathcal{D}V \exp \left\{ - \int d^D x \int d^D x' \left[\frac{1}{2} R^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') V(\mathbf{x}) V(\mathbf{x}') - j(\mathbf{x}) V(\mathbf{x}) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \right] \right\}. \quad (2.11)$$

Man sieht mit der Definition der Mittelwerte (2.10) sofort, dass sich die Korrelationen durch funktionale Ableitung nach den Strömen ergeben:

$$\overline{V(\mathbf{x}_1)} = \frac{\delta}{\delta j(\mathbf{x}_1)} I[j] \Big|_{j(\mathbf{x})=0} \quad (2.12)$$

$$\overline{V(\mathbf{x}_1) V(\mathbf{x}_2)} = \frac{\delta^2}{\delta j(\mathbf{x}_1) \delta j(\mathbf{x}_2)} I[j] \Big|_{j(\mathbf{x})=0}. \quad (2.13)$$

Mittels quadratischer Ergänzung wird das Funktionalintegral (2.11) ausgeführt

$$I[j] = \int \mathcal{D}V \exp \left\{ - \int d^D x \int d^D x' \left[\frac{1}{2} (R^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') V(\mathbf{x}) V(\mathbf{x}') - 2\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') j(\mathbf{x}) V(\mathbf{x}) + R(\mathbf{x} - \mathbf{x}') j(\mathbf{x}) j(\mathbf{x}')) - \frac{1}{2} R(\mathbf{x} - \mathbf{x}') j(\mathbf{x}) j(\mathbf{x}') \right] \right\}. \quad (2.14)$$

Die Berechnung erfolgt unter Beachtung des Funktionalintegralmaßes (2.6), und das Ergebnis lautet:

$$I[j] = \exp \left\{ \frac{1}{2} \int d^D x \int d^D x' R(\mathbf{x} - \mathbf{x}') j(\mathbf{x}) j(\mathbf{x}') \right\}. \quad (2.15)$$

Funktionale Ableitung nach den Strömen ergibt sofort die richtigen Korrelationen nach (2.1)

$$\frac{\delta}{\delta j(\mathbf{x}_1)} I[j] \Big|_{j(\mathbf{x})=0} = 0 \quad (2.16)$$

$$\frac{\delta^2}{\delta j(\mathbf{x}_1) \delta j(\mathbf{x}_2)} I[j] \Big|_{j(\mathbf{x})=0} = R(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2). \quad (2.17)$$

2.2 Replika-Methode

Man möchte das unordnungsgemittelte großkanonische Potential Ω eines wechselwirkenden Bose-Gases in einer beliebigen Falle berechnen. Dazu benötigt man den unordnungsgemittelten Logarithmus der großkanonischen Zustandssumme \mathcal{Z} (vgl. [26, (1.178)]):

$$\Omega = -\frac{1}{\beta} \overline{\ln \mathcal{Z}}. \quad (2.18)$$

Hierbei bezeichnet $\beta = 1/k_B T$ die inverse Temperatur, wobei k_B die Boltzmann-Konstante ist und T die Temperatur. Die großkanonische Zustandssumme ist bekanntlich definiert durch

$$\mathcal{Z} = \text{Sp} \left(e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} \right), \quad (2.19)$$

wobei \hat{H} der Hamiltonoperator und \hat{N} der Teilchenzahloperator ist [27, Kapitel 2]. Es ist aber

$$\ln \overline{\mathcal{Z}} \neq \overline{\ln \mathcal{Z}}. \quad (2.20)$$

Daher berechnet man für kleine N

$$\mathcal{Z}^N = e^{N \ln \mathcal{Z}} = 1 + N \ln \mathcal{Z} + \dots. \quad (2.21)$$

Unordnungsgemittelt folgt daraus

$$\Omega = -\frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow 0} \frac{1}{N} \left\{ \overline{\mathcal{Z}^N} - 1 \right\}. \quad (2.22)$$

Man führt nun die bosonischen Felder $\psi(\mathbf{x}, \tau)$ und $\psi^*(\mathbf{x}, \tau)$ ein. Diese sind periodisch in der Imaginärzeit τ , also

$$\psi(\mathbf{x}, \tau + \hbar\beta) = \psi(\mathbf{x}, \tau). \quad (2.23)$$

Die Imaginärzeit τ stellt hierbei die Wick-rotierte Realzeit t dar, also

$$t = -i\tau. \quad (2.24)$$

Die Periodizität der bosonischen Felder soll nun kurz hergeleitet werden. Man möchte den Erwartungswert

$$O(t) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{Sp} \left(\hat{O}(t) e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} \right) \quad (2.25)$$

eines beliebigen Heisenberg-Operators $\hat{O}(t)$ berechnen, der die Zeitentwicklung

$$\hat{O}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}(\hat{H} - \mu\hat{N})t} \hat{O}(0) e^{-\frac{i}{\hbar}(\hat{H} - \mu\hat{N})t} \quad (2.26)$$

besitzt. Damit folgt aus (2.25)

$$O(t) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{Sp} \left(e^{\frac{i}{\hbar}(\hat{H} - \mu\hat{N})t} \hat{O}(0) e^{-\frac{i}{\hbar}(\hat{H} - \mu\hat{N})t} e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} \right). \quad (2.27)$$

Dies ist aber

$$O(t) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{Sp} \left(e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} e^{\frac{i}{\hbar}(\hat{H} - \mu\hat{N})(t - i\hbar\beta)} \hat{O}(0) e^{-\frac{i}{\hbar}(\hat{H} - \mu\hat{N})(t - i\hbar\beta)} \right). \quad (2.28)$$

Wegen der zyklischen Vertauschbarkeit der Operatoren unter der Spur gilt damit

$$O(t) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{Sp} \left(e^{\frac{i}{\hbar}(\hat{H} - \mu\hat{N})(t - i\hbar\beta)} \hat{O}(0) e^{-\frac{i}{\hbar}(\hat{H} - \mu\hat{N})(t - i\hbar\beta)} e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} \right). \quad (2.29)$$

Damit, und mit Hilfe der Definition des Erwartungswertes in (2.25), folgt aber

$$O(t) = O(t - i\hbar\beta), \quad (2.30)$$

und in Imaginärzeit nach Wick-Rotation (2.24)

$$O(\tau) = O(\tau + \hbar\beta). \quad (2.31)$$

Da auch der Feldoperator $\hat{\psi}(\mathbf{x}, t)$ die geforderte Zeitabhängigkeit (2.26) besitzt, ist die Periodizität der Felder in der Imaginärzeit bewiesen. Die Spur in (2.19) darf daher nur über die Bose-Felder gebildet werden, die diese Periodizität besitzen.

Die Wick-Rotation ist eine übliche Methode, um aus Abhängigkeiten von der Zeit (Realzeit) Abhängigkeiten von der Temperatur (Imaginärzeit) zu erhalten, siehe dazu [28, Kapitel 3]. Die Periodizität der ψ und ψ^* in der Imaginärzeit wird bei Integrationen über diese Felder mit dem Symbol \oint angedeutet. $\oint D\psi$ ist also die Integration über alle in der Imaginärzeit periodischen Felder $\psi(\mathbf{x}, \tau)$. Man führt nun drei Potentiale ein:

- Unordnungspotential $V(\mathbf{x})$
- Fallenpotential $U(\mathbf{x})$
- Wechselwirkungspotential $U_{\text{int}}(\mathbf{x})$.

Falls keine Falle betrachtet wird, so wird der Index int beim Wechselwirkungspotential später weggelassen. Für ultrakalte Atome ist die s-Wellen-Streuung die dominante Wechselwirkung [6], für welche sich die Wechselwirkung durch das Pseudopotential

$$U_{\text{int}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = g\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (2.32)$$

darstellen lässt [29, Kapitel 10]. Die Kopplungskonstante g ist (in 0. Näherung der T-Matrix-Renormierungsmethode [30]) gegeben durch

$$g = \frac{4\pi\hbar^2}{M} a_s, \quad (2.33)$$

wobei a_s die s-Wellen-Streulänge ist. Diese Spezialisierung wird im Folgenden durchgängig verwendet, da nicht die genauen Auswirkungen verschiedener realer Potentiale, sondern die Auswirkungen der Unordnung untersucht werden sollen. Möchte man die Auswirkungen anderer Wechselwirkungspotentiale untersuchen, so ändert sich lediglich der Wechselwirkungsbeitrag. Das Ergebnis einer solchen Verallgemeinerung findet sich in Kapitel 4.

Man definiert die quantenmechanische Zustandssumme mit Hilfe des Funktionalintegrals über ψ und ψ^* bekanntlich mittels

$$\mathcal{Z}_{QM} = \int \mathcal{D}\psi \int \mathcal{D}\psi^* e^{i\tilde{\mathcal{A}}[\psi^*, \psi]/\hbar}. \quad (2.34)$$

Um die dabei auftretende Wirkung $\tilde{\mathcal{A}}[\psi^*, \psi]$ herzuleiten, betrachtet man die Bewegungsgleichung für die klassischen Felder $\psi(\mathbf{x}, t)$ und dessen adjungiertem $\psi^*(\mathbf{x}, t)$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = \frac{\delta H}{\delta \psi^*}(\mathbf{x}, t), \quad (2.35)$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\mathbf{x}, t) = \frac{\delta H}{\delta \psi}(\mathbf{x}, t). \quad (2.36)$$

$H(\mathbf{x}, t)$ bezeichnet hier die klassische Hamiltonfunktion. Multipliziert man nun (2.35) mit $\delta\psi^*(\mathbf{x}, t)$ und (2.36) mit $\delta\psi(\mathbf{x}, t)$ und addiert beide Gleichungen, so führt eine Integration über die Raum-Zeit-Koordinaten auf

$$\int_{t_a}^{t_b} dt \int d^D x \left\{ i\hbar \left[\delta\psi^*(\mathbf{x}, t) \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) - \delta\psi(\mathbf{x}, t) \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\mathbf{x}, t) \right] - \left[\delta\psi^*(\mathbf{x}, t) \frac{\delta H}{\delta \psi^*}(\mathbf{x}, t) + \delta\psi(\mathbf{x}, t) \frac{\delta H}{\delta \psi}(\mathbf{x}, t) \right] \right\} = 0. \quad (2.37)$$

Der Term mit den Zeitableitungen wird nun durch partielle Integration umgeformt. Randterme tragen nicht bei, da die Variationen $\delta\psi(\mathbf{x}, t)$ und $\delta\psi^*(\mathbf{x}, t)$ an den Rändern verschwinden sollen. Es wird außerdem die Rechenregel benutzt, dass Variation und partielle Ableitungen vertauschen. Damit kann man obigen Ausdruck umformen zu

$$\delta \int_{t_a}^{t_b} dt \int d^D x \left\{ \psi^*(\mathbf{x}, t) i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) - \mathcal{H}(\mathbf{x}, t) \right\} = 0. \quad (2.38)$$

Dabei ist \mathcal{H} die Hamilton-Dichte, also ist die Hamilton-Funktion $H(t) = \int d^D x \mathcal{H}(\mathbf{x}, t)$. Damit bekommt man aus den klassischen Feldgleichungen (2.35) und (2.36) die Wirkung

$$\tilde{\mathcal{A}}[\psi^*, \psi] = \int_{t_a}^{t_b} dt \int d^D x \left\{ \psi^*(\mathbf{x}, t) i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) - \mathcal{H}(\mathbf{x}, t) \right\} \quad (2.39)$$

in Realzeit. Deren Variation verschwindet also nach (2.38). Durch die Wick-Rotation (2.24) und Verwendung von $t_b - t_a = -i\hbar\beta$ bekommt man nun die Euklidische Wirkung

$$\check{\mathcal{A}}[\psi^*, \psi] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \left\{ \psi^*(\mathbf{x}, \tau) \hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \psi(\mathbf{x}, \tau) + \mathcal{H}(\mathbf{x}, \tau) \right\}. \quad (2.40)$$

Mit deren Hilfe kann man nun die großkanonische Zustandssumme (2.19) berechnen. Die Spurbildung geschieht, analog zur Spurbildung bei der quantenmechanischen Zustandssumme (2.34), wiederum durch Funktionalintegration der bosonischen Felder ψ und ψ^* ,

$$\mathcal{Z} = \oint \mathcal{D}\psi \oint \mathcal{D}\psi^* e^{-\check{\mathcal{A}}[\psi^*, \psi]/\hbar}, \quad (2.41)$$

wenn man berücksichtigt, dass im großkanonischen Ensemble die Energie um einen Beitrag zu vermindern ist, der den Teilchenaustausch mit der Umgebung beschreibt. Demnach ist von der Wirkung (2.40) noch das chemische Potential multipliziert mit der Teilchenzahl des bosonischen klassischen Feldes $\psi^*(\mathbf{x}, \tau)\psi(\mathbf{x}, \tau)$ abzuziehen. Man erhält also die Wirkung

$$\mathcal{A}[\psi^*, \psi] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \left\{ \psi^*(\mathbf{x}, \tau) \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} + \mathcal{H}(\mathbf{x}, \tau) - \mu \right] \psi(\mathbf{x}, \tau) \right\}. \quad (2.42)$$

Die Hamilton-Funktion ist bei Beachtung einer beliebigen 2-Teilchen-Wechselwirkung $U_{\text{int}}(\mathbf{x})$ gegeben durch

$$\begin{aligned} H(\tau) = & \int d^D x \left\{ \psi^*(\mathbf{x}, \tau) \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + V(\mathbf{x}) + U(\mathbf{x}) \right] \psi(\mathbf{x}, \tau) \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \int d^D x' \psi^*(\mathbf{x}, \tau) \psi^*(\mathbf{x}', \tau) U_{\text{int}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}, \tau) \psi(\mathbf{x}', \tau) \right\}. \end{aligned} \quad (2.43)$$

Da im Nullteilchenzustand keine Energie vorhanden sein soll, muss in Erwartungswerten die korrekte Zeitordnung des Pfadintegrals, analog zur Operatorordnung im Operatorformalismus, berücksichtigt werden, die bisher nicht beachtet wurde: Die Imaginärzeiten des ψ^* -Feldes müssen in normalgeordneten Operatoren stets infinitesimal größer sein als die des ψ -Feldes zur gleichen Zeit. Damit definiert man

$$\psi^*(\mathbf{x}, \tau^+) = \lim_{\eta \searrow 0} \psi^*(\mathbf{x}, \tau + \eta). \quad (2.44)$$

Bei Verwendung von lokaler Wechselwirkung (2.32) ist die Wirkung $\mathcal{A}[\psi^*, \psi]$ daher gegeben durch

$$\begin{aligned} \mathcal{A}[\psi^*, \psi] = & \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \left\{ \psi^*(\mathbf{x}, \tau) \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta - \mu + V(\mathbf{x}) + U(\mathbf{x}) \right] \psi(\mathbf{x}, \tau) \right. \\ & \left. + \frac{g}{2} \psi^*(\mathbf{x}, \tau)^2 \psi(\mathbf{x}, \tau)^2 \right\}. \end{aligned} \quad (2.45)$$

Da die Wirkung kein Erwartungswert ist, ist dort auch keine Zeitordnung zu berücksichtigen. Damit kann man nun auch \mathcal{Z}^N hinschreiben, und gleich die Unordnungsmittelung durchführen:

$$\begin{aligned} \overline{\mathcal{Z}^N} &= \left\{ \prod_{\alpha=1}^N \oint \mathcal{D}\psi_{\alpha}^* \oint \mathcal{D}\psi_{\alpha} \right\} \exp \left\{ \frac{-1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \sum_{\alpha=1}^N \psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta + U(\mathbf{x}) - \mu \right] \psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \right\} \\ &\times \exp \left\{ \frac{-g}{2\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \psi^*(\mathbf{x}, \tau)^2 \psi(\mathbf{x}, \tau)^2 \right\} \overline{\exp \left\{ \int d^D x V(\mathbf{x}) \frac{-1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} \sum_{\alpha=1}^N \psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \right\}}. \end{aligned} \quad (2.46)$$

Die Wirkung besteht aus drei nachfolgend definierten Teilen. Zunächst tritt die ungestörte Wirkung eines freien Teilchens ohne Wechselwirkung und Unordnung in der Falle für N Bose-Felder auf:

$$\mathcal{A}^{(0)}[\psi^*, \psi] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x \int d^D x' \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\alpha'=1}^N \psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) G_{\alpha\alpha'}^{(0)-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') \psi_{\alpha'}(\mathbf{x}, \tau'). \quad (2.47)$$

Für den in der vorherigen Gleichung aufgetretenen Integralkern $G_{\alpha\alpha'}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau')$ gilt hierbei

$$G_{\alpha\alpha'}^{(0)-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = G^{(0)-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') \delta_{\alpha\alpha'}. \quad (2.48)$$

Der α -unabhängige Teil des Integralkernes schließlich ist definiert durch

$$G^{(0)-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = \left\{ \hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta + U(\mathbf{x}) - \mu \right\} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(\tau - \tau'). \quad (2.49)$$

Der wechselwirkungsabhängige Teil der Wirkung ist

$$\mathcal{A}^{(\text{int})}[\psi^*, \psi] = \frac{g}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \sum_{\alpha=1}^N \psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau)^2 \psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau)^2. \quad (2.50)$$

Es bleibt der unordnungsabhängige Teil, der mittels des erzeugenden Funktionals (2.11) einfach berechenbar ist, wenn man die folgende Substitution verwendet:

$$j(\mathbf{x}) = \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \sum_{\alpha=1}^N \psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau). \quad (2.51)$$

Man erhält dann sofort mit dem Ergebnis für das erzeugende Funktional (2.15)

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^{(\text{u})}[\psi^*, \psi] &= -\frac{1}{2\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x \int d^D x' R(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \\ &\times \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\alpha'=1}^N \psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau'). \end{aligned} \quad (2.52)$$

Wie man sieht, entspricht die Unordnung einer attraktiven Wechselwirkung, die bilokal in der Imaginärzeit ist. Im Allgemeinen ist sie auch bilokal im Ort. Zu verstehen ist die Tatsache, dass die induzierte Wechselwirkung attraktiv ist, dadurch, dass die Atome in einem Zufallspotential stets in einer lokalen Potentiallandschaft existieren, die lokale Minima besitzt. In diese Minima fallen die Atome, was man auch als effektive attraktive Wechselwirkung betrachten kann.

Das Unordnungsmittel $\overline{\mathcal{Z}^N}$ ergibt sich mit den eben eingeführten Bezeichnungen zu

$$\overline{\mathcal{Z}^N} = \left\{ \prod_{\alpha=1}^N \oint \mathcal{D}\psi_{\alpha}^* \oint \mathcal{D}\psi_{\alpha} \right\} e^{-(\mathcal{A}^{(0)}[\psi^*, \psi] + \mathcal{A}^{(\text{int})}[\psi^*, \psi] + \mathcal{A}^{(\text{u})}[\psi^*, \psi])/\hbar}. \quad (2.53)$$

Im Prinzip müssten nun die Funktionalintegrale ausgeführt werden. Da dies nicht analytisch möglich ist, verwendet man verschiedene Näherungsmethoden, um analytische Voraussagen für eine Theorie ungeordneter Bosonen zu bekommen.

Kapitel 3

Feynmansche Störungstheorie für T_c

Bei einem verdünnten Bose-Gas tritt der Phasenübergang in die Kondensatphase bekanntermaßen bei einer kritischen Temperatur T_c auf. Im folgenden wird die Verschiebung der kritischen Temperatur (T_c -Shift), die bei Berücksichtigung eines Zufallspotentials entsteht, mit Hilfe der Feynman-Störungstheorie berechnet.

3.1 Überblick

Nach Einführung einiger Definitionen wird eine Störungsreihe für das großkanonische Potential bezüglich Unordnung und Wechselwirkung mit Hilfe von Feynman-Diagrammen entwickelt. Diese wird dann bei Annahme eines wechselwirkungsfreien Bose-Gases für ein homogenes BEC und ein BEC in einer Falle bis zur ersten Ordnung in der Unordnung ausgewertet. Danach folgt, ebenfalls bei Annahme eines wechselwirkungsfreien Gases, die Definition und Berechnung der Selbstenergie bis zur ersten Ordnung in der Unordnung, um damit das kritische chemische Potential zu bestimmen. Daraus kann man die Verschiebung der kritischen Temperatur in erster Ordnung der Unordnung berechnen. Es werden insbesondere zwei Fälle untersucht, zum einen die Annahme einer Gaußschen Korrelation des Unordnungspotentials, zum anderen die Annahme einer Lorentz-Korrelation.

3.2 Greensche Funktion des ungestörten Systems

Zur störungstheoretischen Behandlung des Systems benötigt man die Greensche Funktion des ungestörten Systems ohne Falle. Die Definition dieser Greenschen Funktion geschieht im allgemeinen durch den zeitgeordneten Erwartungswert der Paarkorrelation [31, (19.4)], d.h.

$$\begin{aligned} G_{\alpha\alpha'}^{(0)}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') &= \left\langle T \left[\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \hat{\psi}_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \right] \right\rangle^{(0)} \\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}_0} \oint \mathcal{D}\psi_\alpha^* \oint \mathcal{D}\psi_\alpha \psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') e^{-\mathcal{A}^{(0)}[\psi^*, \psi]/\hbar}, \end{aligned} \quad (3.1)$$

wobei das T die Zeitordnung beschreibt. Die Greensche Funktion ist hier unter Berücksichtigung der ungestörten Wirkung (2.47) und des ungestörten, replikasymmetrischen Integralkerns (2.48),(2.49) durch folgende Gleichung gegeben:

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau'' \int d^D x'' \sum_{\alpha''=1}^N G_{\alpha\alpha''}^{(0)-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}'', \tau'') G_{\alpha''\alpha'}^{(0)}(\mathbf{x}'', \tau''; \mathbf{x}', \tau') = \hbar \delta_{\alpha\alpha'} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(\tau - \tau'). \quad (3.2)$$

Die Greensche Funktion ist also das funktionale Inverse des Integralkerns. Da der Integralkern replikasymmetrisch ist (2.48), gilt

$$G_{\alpha\alpha'}^{(0)}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = G^{(0)}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') \delta_{\alpha\alpha'}. \quad (3.3)$$

Wegen der Homogenität der Hamilton-Operatoren kann man schließen, dass die Greensche Funktion und der Integralkern nur von der Differenz der Koordinaten abhängen. Damit ist

$$G^{(0)-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = G^{(0)-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}', \tau - \tau'). \quad (3.4)$$

$$G^{(0)}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = G^{(0)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}', \tau - \tau'). \quad (3.5)$$

Nun definiert man die Fourier-Matsubara-Transformierte einer Funktion F mittels

$$F(\mathbf{x} - \mathbf{x}', \tau - \tau') = \frac{1}{\hbar\beta} \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_m(\tau-\tau')} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} F(\mathbf{k}, \omega_m) \quad (3.6)$$

mit den Matsubara-Frequenzen

$$\omega_m = \frac{2\pi}{\hbar\beta} m \quad (3.7)$$

(vgl. auch [31, (25.15) und (25.10)]). Mit Hilfe dieser Transformation berechnet man mittels der Definition der Greenschen Funktion (3.2), unter Beachtung des ungestörten Integralkerns (2.49), die Greensche Funktion

$$G^{(0)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}', \tau - \tau') = \frac{1}{\beta} \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_m(\tau-\tau')} \frac{1}{-i\hbar\omega_m + \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu\right)}. \quad (3.8)$$

Möchte man mit dieser Greenschen Funktion normalgeordnete Erwartungswerte zur Zeit τ berechnen, so ist gegebenenfalls eine infinitesimale Imaginärzeit η einzuführen, gemäß $\tau' = \tau^+ = \tau + \eta$.

3.3 Feynman-Diagramme

Man möchte nach Herleitung der Gleichungen für die Wirkung in Kapitel 2 Unordnung und auch Wechselwirkung störungstheoretisch behandeln. Die Falle wird später nur im Rahmen der lokalen Dichte-Näherung behandelt [32]. Für dieses Kapitel bedeutet das, dass am Ende der Berechnung einer Ordnung der Störungstheorie ohne Falle zwei Ersetzungen durchgeführt werden. Zum einen wird das chemische Potential μ durch das lokale chemische Potential $\mu - U(\mathbf{x})$ mit Falle ersetzt, zum anderen wird ein Volumenfaktor V in ein Integral über die Raumkoordinaten umgewandelt:

- $\mu \rightarrow \mu - U(\mathbf{x})$
- $V \rightarrow \int d^D x$

Dies ist nur dann sinnvoll, wenn die Falle auf der Skala der Korrelationslänge des Potentials und der Abschirmlänge des Kondensats schwach ortsabhängig ist. Man legt nun unter Beachtung, dass die Zahlen 1 und 2 für einen bestimmten Raum-Zeit-Punkt und eine bestimmte Feldkomponente stehen, die folgenden Feynman-Regeln fest:

- Greensche Funktion des ungestörten Systems:

$$1 \longleftrightarrow 2 \equiv G_{\alpha_1 \alpha_2}^{(0)}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2), \quad (3.9)$$

- zweifacher u-Vertex (Unordnungs-Effekt):

$$\begin{array}{c} \diagup \\ | \\ \diagdown \end{array} \begin{array}{c} \diagdown \\ | \\ \diagup \end{array} \equiv \frac{1}{2\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int d^D x_1 \int d^D x_2 R(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \sum_{\alpha_1=1}^N \sum_{\alpha_2=1}^N, \quad (3.10)$$

- int-Vertex (Wechselwirkung):

$$\begin{array}{c} \diagup \\ \diagdown \end{array} \equiv -\frac{g}{2\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \sum_{\alpha=1}^N. \quad (3.11)$$

Ein einzelner Vertex ist ein Punkt, an dem sich mindestens 3 Linien treffen. Die Definition des u-Vertex geschieht durch die Definition des zweifachen u-Vertex, da sie nur so eindeutig wird. Der Grund ist, dass die Unordnung $R(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)$ stets zwischen zwei u-Vertizes wirkt.

Man beachte, dass $\overline{\mathcal{Z}^N}$ aus allen Feynman-Diagrammen ohne äußere Propagatorlinien besteht, die sich mit diesen Feynman-Regeln bilden lassen. Im Replika-Limes $N \rightarrow 0$ tragen aber wegen der Berechnung des großkanonischen Potentials mit N Replika-Feldern (2.22) nur diejenigen bei, die einen Faktor N liefern. Wegen der Feynman-Regeln führt eine Schleife mit M u-Vertizes und genau so vielen Linien, also Greenschen Funktionen, zu einem Faktor N , wobei M und N in keiner Beziehung zueinander stehen. Der Grund ist, dass die Greenschen Funktionen $G_{\alpha_1\alpha_2}^{(0)}$ proportional zum Kronecker-Symbol $\delta_{\alpha_1\alpha_2}$ sind. Ein einzelner u-Vertex ist proportional zur Summe über das zu diesem Punkt gehörende α :

$$\begin{array}{c} \curvearrowright \\ | \\ \curvearrowleft \end{array} \begin{array}{c} \curvearrowleft \\ | \\ \curvearrowright \end{array} \dots \begin{array}{c} \curvearrowleft \\ | \\ \curvearrowright \end{array} \begin{array}{c} \curvearrowright \\ | \\ \curvearrowleft \end{array} \propto \sum_{\alpha_1=1}^N \sum_{\alpha_2=1}^N \dots \sum_{\alpha_{M-1}=1}^N \sum_{\alpha_M=1}^N \delta_{\alpha_1\alpha_2} \delta_{\alpha_2\alpha_3} \dots \delta_{\alpha_{M-1}\alpha_M} \delta_{\alpha_M\alpha_1} = \sum_{\alpha_1=1}^N \delta_{\alpha_1\alpha_1} = N. \quad (3.12)$$

Ein nur aus int-Vertizes bestehendes Diagramm liefert aus analogen Gründen ebenfalls einen Faktor N . Nichtzusammenhängende Diagramme beinhalten mindestens einen Faktor N^2 und fallen daher im Limes $N \rightarrow 0$ weg. Bei den zusammenhängenden Diagrammen bleiben im Limes $N \rightarrow 0$ nur diejenigen mit maximal einer Schleife an den u-Vertizes übrig:

$$\Omega = -\frac{1}{\beta} \sum \{\text{alle zusammenhängenden Vakuumdiagramme mit maximal 1 Schleife zwischen u-Vertizes}\}. \quad (3.13)$$

Für die verbleibenden Vakuumdiagramme folgen daher vereinfachte Feynman-Regeln:

- Greensche Funktion des ungestörten Systems:

$$1 \longrightarrow 2 \equiv G^{(0)}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) \quad (3.14)$$

- zweifacher u-Vertex (Unordnungs-Effekt):

$$\begin{array}{c} \diagup \\ | \\ \diagdown \end{array} \begin{array}{c} \diagdown \\ | \\ \diagup \end{array} \equiv \frac{1}{2\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int d^D x_1 \int d^D x_2 R(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \quad (3.15)$$

- int-Vertex (Wechselwirkung):

$$\begin{array}{c} \diagup \\ \times \\ \diagdown \end{array} \equiv -\frac{g}{2\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \quad (3.16)$$

Mit Hilfe einer grafischen Rekursion, wie sie z.B. in Kleinert, Pelster und Van den Bossche [33] entwickelt wird, ergibt sich die folgende diagrammatische Störungsreihe:

$$\begin{aligned} \Omega = \Omega^{(0)} & - \frac{1}{\beta} \left\{ 2 \left(\text{two circles} \right) + \text{circle with wavy line} + 4 \left(\text{two circles with wavy line} \right) + 4 \left(\text{circle with two wavy lines} \right) \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \left[2 \left(\text{circle with two wavy lines} \right) + 4 \left(\text{circle with four wavy lines} \right) + 16 \left(\text{three circles} \right) + 4 \left(\text{circle with four wavy lines} \right) + \dots \right] \right\}. \quad (3.17) \end{aligned}$$

Man sieht, dass sich die Beiträge von Unordnung und Wechselwirkung in 1. Ordnung Störungstheorie in R und g gerade addieren. Unordnungs- und Wechselwirkungsbeitrag werden also als von gleicher Ordnung angenommen. Daher betrachtet man im Folgenden $g = 0$, d.h. man vernachlässigt die Wechselwirkungsterme vollständig. Die verbleibende Reihe ist gerade die Störungsreihe für die Unordnung, welche in 1. Ordnung in Wechselwirkung und Unordnung unabhängig von der Wechselwirkung untersucht werden kann.

3.4 Nullte Ordnung

Es folgt die Berechnung des großkanonischen Potentials des idealen Bose-Gases ohne Unordnung ($R = 0$) in einer beliebigen Falle, das mit $\Omega^{(0)}$ bezeichnet wird.

Für die Berechnung des großkanonischen Potentials wird nach (2.18) die Zustandssumme benötigt. Unter Benutzung der Definition der Zustandssumme mittels (2.41) und der Wirkung (2.45) für $g = 0$ erhält man für die Zustandssumme des freien Bose-Gases

$$\mathcal{Z}^{(0)} = \oint \mathcal{D}\psi \oint \mathcal{D}\psi^* \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \psi^*(\mathbf{x}, \tau) \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta - \mu \right] \psi(\mathbf{x}, \tau) \right\}. \quad (3.18)$$

Da die gaußartigen Funktionalintegrale im Prinzip wie gewöhnliche Gaußintegrale berechnet werden, lässt sich das Ergebnis sofort hinschreiben

$$\mathcal{Z}^{(0)} = \frac{\mathcal{N}}{\text{Det} \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta - \mu \right]}. \quad (3.19)$$

\mathcal{N} ist hierbei eine Normierungskonstante, die formal unendlich groß ist. Alle physikalischen Größen enthalten diese Konstante nicht. Diesen formalen Ausdruck schreibt man um in

$$\mathcal{Z}^{(0)} = \mathcal{N} \exp \left\{ -\text{Tr} \ln \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta - \mu \right] \right\}. \quad (3.20)$$

Das großkanonische Potential ohne Unordnung ist nun nach (2.18) gegeben durch

$$\Omega^{(0)} = \frac{1}{\beta} \text{Tr} \ln \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta - \mu \right]. \quad (3.21)$$

Hinzu kommt im Prinzip eine formal unendlich große additive Konstante, die hier aber vernachlässigt wurde, da sie nicht von physikalischen Größen abhängt. Gemeint ist hier also die Spur über den Logarithmus des Integralkerns, der auch als TraceLog bezeichnet wird. Er ist definiert als Summe über die Logarithmen der Eigenwerte des Integralkerns. Die Eigenwertgleichung liefert die Eigenwerte

$$\lambda_{\mathbf{n},m} = -i\hbar\omega_m + E_{\mathbf{n}} - \mu. \quad (3.22)$$

$E_{\mathbf{n}}$ bezeichnet hierbei die Energieeigenwerte des Systems, die gegebenenfalls auch die Anwesenheit eines Fallenspotentials berücksichtigen können.

Somit berechnet sich die Spur über den Logarithmus des Integralkerns

$$\Omega^{(0)} = \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{n}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \ln(-i\hbar\omega_m + E_{\mathbf{n}} - \mu). \quad (3.23)$$

Dieser Ausdruck ist noch nicht wohldefiniert, da nicht festgelegt ist, wie $G^{(0)-1}(\mathbf{0}, \tau = 0)$ zu verstehen ist. In Erwartungswerten sollen die gleichzeitigen Operatoren stets normalgeordnet sein, da sie aus einem normalgeordneten Hamilton-Operator abgeleitet werden. Daher ist nun $\tau = 0$ als $\tau = \eta$ für $\eta > 0, \eta \rightarrow 0$ zu interpretieren. Dies führt auf den Ausdruck

$$\Omega^{(0)} = \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{n}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \ln(-i\hbar\omega_m + E_{\mathbf{n}} - \mu) e^{i\omega_m \eta}, \quad (3.24)$$

wobei η wiederum eine infinitesimale Imaginärzeit darstellt. Auf Grund der Zeitordnung ist dieser Ausdruck wohldefiniert. Außerdem ist er mathematisch gesprochen im Distributionensinne zu verstehen. Wie dieser Ausdruck behandelt wird, findet sich beispielsweise in Fetter und Walecka [31, (25.32)]. Hier wird jedoch eine andere Berechnungsmethode verwendet. Mit Hilfe der Poisson-Formel (A.7) schreibt man diese Summe um in Summe und Integral

$$\Omega^{(0)} = \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{n}} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{\hbar\beta}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \ln[-i\hbar\omega + E_{\mathbf{n}} - \mu] e^{i\omega(\eta - \hbar\beta k)}. \quad (3.25)$$

An dieser Stelle wird der sogenannte Schwinger-Trick benötigt, d.h. die Identität

$$\frac{1}{a^x} = \frac{1}{\Gamma(x)} \int_0^{\infty} d\sigma e^{-\sigma a} \sigma^{x-1}, \quad x > 0, \operatorname{Re}(a) > 0. \quad (3.26)$$

Zur Ersetzung des Logarithmus zieht man diese dann in folgender Weise heran:

$$\ln(a) = -\left. \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{a^x} \right|_{x=0} = -\left. \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{1}{\Gamma(x)} \int_0^{\infty} d\sigma e^{-\sigma a} \sigma^{x-1} \right\} \right|_{x=0}. \quad (3.27)$$

Beachtet man, dass man bei Distributionen stets Integrale vertauschen darf, folgt für den TraceLog

$$\Omega^{(0)} = \frac{1 - \hbar\beta}{\beta} \frac{1}{2\pi} \sum_{\mathbf{n}} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \left. \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{1}{\Gamma(x)} \int_0^{\infty} d\sigma \sigma^{x-1} e^{-\sigma(E_{\mathbf{n}} - \mu)} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\omega(\eta - \hbar\beta k + \hbar\sigma)} \right\} \right|_{x=0}. \quad (3.28)$$

Das ω -Integral lässt sich sofort ausführen. Hier erhält man die δ -Distribution. Stehen bleibt

$$\Omega^{(0)} = \frac{1 - \beta}{\beta} \frac{1}{2\pi} \sum_{\mathbf{n}} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \left. \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{1}{\Gamma(x)} \int_0^{\infty} d\sigma \sigma^{x-1} e^{-\sigma(E_{\mathbf{n}} - \mu)} 2\pi \delta\left(\frac{\eta}{\hbar} - \beta k + \sigma\right) \right\} \right|_{x=0}. \quad (3.29)$$

$\Gamma(x)$ divergiert für $x \searrow 0$ wie $1/x$ [34, (8.321.1)]. Folglich bleibt übrig

$$\Omega^{(0)} = -\frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{n}} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \left\{ \int_0^{\infty} d\sigma \sigma^{-1} e^{-\sigma(E_{\mathbf{n}} - \mu)} \delta\left(\frac{\eta}{\hbar} - \beta k + \sigma\right) \right\}. \quad (3.30)$$

Das letzte Integral lässt sich einfach ausführen. Auf Grund von $\eta \rightarrow 0^+$ tragen nur Summanden mit $k \geq 1$ bei. Das Ergebnis lautet nach Grenzübergang $\eta \rightarrow 0$

$$\Omega^{(0)} = -\frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{n}} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k} e^{-\beta k(E_{\mathbf{n}} - \mu)}. \quad (3.31)$$

Dies ist die Taylor-Reihe des Logarithmus, also gilt

$$\Omega^{(0)} = \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{n}} \ln \left[1 - e^{-\beta(E_{\mathbf{n}} - \mu)} \right]. \quad (3.32)$$

Semiklassisch und mit Hilfe der lokalen Dichte-Näherung wird die Summe über die Quantenzahlen durch ein Integral über Impulse und Orte ersetzt, und die quantenmechanischen Energien durch die 1-Teilchen Hamiltonfunktion $H(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2M} + U(\mathbf{x})$ [27, Anhang B]. Das semiklassische Ergebnis für das großkanonische Potential lautet also

$$\Omega^{(0)} = \frac{1}{\beta} \int \frac{d^D x d^D p}{(2\pi\hbar)^D} \ln \left[1 - e^{-\beta(\frac{\mathbf{p}^2}{2M} + U(\mathbf{x}) - \mu)} \right]. \quad (3.33)$$

Das \mathbf{p} -Integral lässt sich nach erneuter Entwicklung des Logarithmus ausführen. Hierzu definiert man die polylogarithmische Funktion $\zeta_{\nu}(z)$

$$\zeta_{\nu}(z) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{z^m}{m^{\nu}}. \quad (3.34)$$

Hinzu kommt die Definition der thermischen de-Broglie-Wellenlänge

$$\lambda = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{Mk_B T}}. \quad (3.35)$$

Damit erhält man das Ergebnis

$$\Omega^{(0)} = -\frac{1}{\beta\lambda^D} \int d^D x \zeta_{D/2+1} \left(e^{-\beta(U(\mathbf{x}) - \mu)} \right). \quad (3.36)$$

Dieses Ergebnis ist das bekannte Ergebnis für das großkanonische Potential des idealen Bose-Gases [27, (4.1.19')] (in der Referenz ohne Falle).

3.4.1 Freies Bose-Gas

Zur Berechnung des großkanonischen Potentials des idealen freien Bose-Gases setze man in (3.36) $U(\mathbf{x}) = 0$. Die Integration über den Raum liefert dann einen Volumenfaktor V .

$$\Omega^{(0)} = -\frac{V}{\beta\lambda^D} \zeta_{D/2+1} \left(e^{\beta\mu} \right). \quad (3.37)$$

3.4.2 Anisotrope harmonische Falle

Für das ideale Bose-Gas in einer anisotropen harmonischen Falle $U(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^D \frac{M}{2} \omega_i^2 x_i^2$ liefert das Ergebnis (3.36) den Ausdruck

$$\Omega^{(0)} = -\frac{1}{\beta} \frac{1}{(\hbar\beta\tilde{\omega})^D} \zeta_{D+1} \left(e^{\beta\mu} \right). \quad (3.38)$$

Hierbei stellt $\tilde{\omega} = \left(\prod_{i=1}^D \omega_i \right)^{1/D}$ das geometrische Mittel der Fallenfrequenzen dar.

3.5 Erste Ordnung

Es folgt die Berechnung des großkanonischen Potentials in 1. Ordnung in R . Wie bereits erwähnt, kann hierbei angenommen werden, dass es keine Wechselwirkung gibt. Eine Auswertung der Feynmanschen Störungsreihe (3.17) liefert

$$\Omega^{(1)} = -\frac{1}{2\beta\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int d^D x_1 \int d^D x_2 R(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) G^{(0)}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) G^{(0)}(\mathbf{x}_2, \tau_2; \mathbf{x}_1, \tau_1). \quad (3.39)$$

Die Gleichung (3.8) liefert die ungestörten Greenschen Funktionen, und man erhält

$$\Omega^{(1)} = -\frac{1}{2\beta^3\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int d^D x_1 \int d^D x_2 \int \frac{d^D k_1}{(2\pi)^D} \int \frac{d^D k_2}{(2\pi)^D} \sum_{m_1=-\infty}^{\infty} \sum_{m_2=-\infty}^{\infty} R(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \frac{e^{i\mathbf{k}_1(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)}}{\left[-i\hbar\omega_{m_1} + \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}_1^2}{2M} - \mu\right)\right]} \frac{e^{i\mathbf{k}_2(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1)}}{\left[-i\hbar\omega_{m_2} + \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}_2^2}{2M} - \mu\right)\right]} e^{-i\omega_{m_1}[\tau_1 - (\tau_2 + \eta)]} e^{-i\omega_{m_2}[\tau_2 - (\tau_1 + \eta)]}. \quad (3.40)$$

Die richtige Operatorordnung wird hier erneut durch die Einführung infinitesimaler η erreicht. Auf Grund der Periodizität der komplexen Exponentialfunktion und wegen der Definition der Matsubara-Frequenzen (3.7) verschwinden bei Integration über eine der Imaginärzeiten τ nun alle Terme mit $m_1 \neq m_2$. Daher kann man die Integration über die τ explizit durchführen. Außerdem kann man die ortsabhängigen Exponentialfunktionen zusammenfassen:

$$\Omega^{(1)} = -\frac{1}{2\beta^3\hbar^2} \int d^D x_1 \int d^D x_2 \int \frac{d^D k_1}{(2\pi)^D} \int \frac{d^D k_2}{(2\pi)^D} \sum_{m_1=-\infty}^{\infty} \sum_{m_2=-\infty}^{\infty} R(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \frac{e^{i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)}}{\left[-i\hbar\omega_{m_1} + \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}_1^2}{2M} - \mu\right)\right] \left[-i\hbar\omega_{m_2} + \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}_2^2}{2M} - \mu\right)\right]} \hbar^2 \beta^2 \delta_{m_1 m_2} e^{i\omega_{m_1} \eta} e^{i\omega_{m_2} \eta}. \quad (3.41)$$

Eine der m -Summen ist nun trivial durchführbar. Die Einführung von Differenzkoordinaten im Ortsraum $\mathbf{x} = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$ erlaubt die Berechnung eines der Ortsintegrale, welches einen Volumenfaktor liefert:

$$\Omega^{(1)} = -\frac{V}{2\beta} \int d^D x \int \frac{d^D k_1}{(2\pi)^D} \int \frac{d^D k_2}{(2\pi)^D} \sum_{m=-\infty}^{\infty} R(\mathbf{x}) \frac{e^{i\mathbf{x}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)}}{\left[-i\hbar\omega_m + \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}_1^2}{2M} - \mu\right)\right] \left[-i\hbar\omega_m + \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}_2^2}{2M} - \mu\right)\right]} e^{2i\omega_m \eta}. \quad (3.42)$$

Um die Summe über die m berechnen zu können, stellt man das Integral nun um:

$$\Omega^{(1)} = -\frac{V}{2\beta} \int d^D x \int \frac{d^D k_1}{(2\pi)^D} \int \frac{d^D k_2}{(2\pi)^D} R(\mathbf{x}) \frac{e^{i\mathbf{x}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)}}{\frac{\hbar^2 \mathbf{k}_1^2}{2M} - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_2^2}{2M}} \left[\sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{e^{2i\omega_m \eta}}{-i\hbar\omega_m + \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}_1^2}{2M} - \mu\right)} - \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{e^{2i\omega_m \eta}}{-i\hbar\omega_m + \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}_2^2}{2M} - \mu\right)} \right]. \quad (3.43)$$

Man benutzt nun die Poisson-Formel (A.7) um die Summe über die m durch ein Integral ausdrücken zu können:

$$\Omega^{(1)} = -\frac{V}{2\beta} \frac{\hbar\beta}{2\pi} \int d^D x \int \frac{d^D k_1}{(2\pi)^D} \int \frac{d^D k_2}{(2\pi)^D} R(\mathbf{x}) \frac{e^{i\mathbf{x}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)}}{\frac{\hbar^2 \mathbf{k}_2^2}{2M} - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_1^2}{2M}} \left[\sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{e^{i\omega(2\eta - \hbar\beta n)}}{-i\hbar\omega + \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}_1^2}{2M} - \mu\right)} - \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{e^{i\omega(2\eta - \hbar\beta n)}}{-i\hbar\omega + \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}_2^2}{2M} - \mu\right)} \right]. \quad (3.44)$$

Die ω -Integrale lassen sich mit Hilfe des Residuensatzes berechnen. Auf Grund des infinitesimalen η bleibt dann nur die Summe über positive $n > 0$ übrig. Danach führt man den Grenzübergang $\eta \rightarrow 0$ durch:

$$\Omega^{(1)} = -\frac{V}{2} \int d^D x \int \frac{d^D k_1}{(2\pi)^D} \int \frac{d^D k_2}{(2\pi)^D} R(\mathbf{x}) \frac{e^{i\mathbf{x}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)}}{\frac{\hbar^2 \mathbf{k}_2^2}{2M} - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_1^2}{2M}} \left[\sum_{n=1}^{\infty} e^{-\beta n \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}_1^2}{2M} - \mu \right)} - \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\beta n \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}_2^2}{2M} - \mu \right)} \right]. \quad (3.45)$$

Diesen Ausdruck kann man umschreiben, und man bekommt den Ausdruck

$$\Omega^{(1)} = V \int d^D x \int \frac{d^D k_1}{(2\pi)^D} \int \frac{d^D k_2}{(2\pi)^D} R(\mathbf{x}) \frac{e^{i\mathbf{x}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)}}{\frac{\hbar^2 \mathbf{k}_1^2}{2M} - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_2^2}{2M}} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\beta n \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}_1^2}{2M} - \mu \right)}. \quad (3.46)$$

Nun soll das Integral über \mathbf{k}_2 berechnet werden. Dazu würde man gerne den Nenner mittels des Schwinger-Tricks (3.26) in den Exponenten befördern. Dies ist beim vorliegenden Integral nicht möglich, da der Nenner kein einheitliches Vorzeichen besitzt. Bei solchen Integralen verwendet man in der Feldtheorie daher eine Modifikation des Schwinger-Tricks, die folgendermaßen abgeleitet werden kann [35]. Bekanntlich ist

$$\int_0^{\infty} d\tau e^{-(\epsilon - ia)\tau} = \frac{1}{\epsilon - ia} = \frac{\epsilon}{\epsilon^2 + a^2} + i \frac{a}{\epsilon^2 + a^2}. \quad (3.47)$$

Der erste Summand ist hierbei für $\epsilon \searrow 0$ eine Darstellung der δ -Funktion. Es ergibt sich daraus

$$\lim_{\epsilon \searrow 0} \int_0^{\infty} d\tau e^{-(\epsilon - ia)\tau} = \pi \delta(a) + i \mathcal{P} \frac{1}{a}, \quad (3.48)$$

wobei \mathcal{P} den Hauptwert des Ausdrucks bezeichnet. Damit folgt

$$\mathcal{P} \frac{1}{a} = \lim_{\epsilon \searrow 0} \text{Im} \int_0^{\infty} d\tau e^{-(\epsilon - ia)\tau}, \quad (3.49)$$

wobei Im den Imaginärteil des Ergebnisses bezeichnet. Dies benutzt man zur Berechnung des Integrals (3.46), indem man dieses Integral als Hauptwertintegral ansieht:

$$\Omega^{(1)} = V \sum_{n=1}^{\infty} e^{\beta n \mu} \int d^D x R(\mathbf{x}) \int \frac{d^D k_1}{(2\pi)^D} \int \frac{d^D k_2}{(2\pi)^D} e^{-\beta n \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_1^2}{2M}} e^{i\mathbf{x}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)} \lim_{\epsilon \searrow 0} \text{Im} \int_0^{\infty} d\tau e^{-\epsilon \tau} \exp \left\{ i \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}_1^2}{2M} - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_2^2}{2M} \right) \tau \right\}. \quad (3.50)$$

Wegen $R(\mathbf{x}) = R(-\mathbf{x})$ kann man $e^{i\mathbf{x}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)}$ durch $e^{i\mathbf{x}(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1)}$ ersetzen. Durch Aufspaltung dieses Terms kann man den Ausdruck daher umschreiben, und erhält

$$\Omega^{(1)} = \frac{V}{2} \sum_{n=1}^{\infty} e^{\beta n \mu} \int d^D x R(\mathbf{x}) \lim_{\epsilon \searrow 0} \text{Im} \int_0^{\infty} d\tau e^{-\epsilon \tau} \int \frac{d^D k_1}{(2\pi)^D} \int \frac{d^D k_2}{(2\pi)^D} \left[\exp \left\{ -\beta n \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_1^2}{2M} + i\mathbf{x}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) + i \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_1^2}{2M} \tau - i \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_2^2}{2M} \tau \right\} + \exp \left\{ -\beta n \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_1^2}{2M} - i\mathbf{x}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) + i \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_1^2}{2M} \tau - i \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_2^2}{2M} \tau \right\} \right]. \quad (3.51)$$

Bei diesen \mathbf{k} -Integralen handelt es sich um Gauß- und Fresnel-Integrale. Die analytische Integration liefert bei beiden Summanden denselben Ausdruck, und das Ergebnis lautet nach Zusammenfassen der Terme

$$\Omega^{(1)} = V \sum_{n=1}^{\infty} e^{\beta n \mu} \int d^D x R(\mathbf{x}) \lim_{\epsilon \searrow 0} \text{Im} \int_0^{\infty} d\tau e^{-\epsilon \tau} \left(\frac{M}{2\pi \hbar^2} \right)^D \frac{1}{[\tau(\tau + i\beta n)]^{D/2}} \exp \left\{ -\frac{M}{2\hbar^2} \left[\frac{1}{i\tau} + \frac{1}{\beta n - i\tau} \right] \mathbf{x}^2 \right\}. \quad (3.52)$$

Diese Formel gilt für allgemeines isotropes $R(\mathbf{x})$, da bei ihrer Berechnung $R(\mathbf{x}) = R(-\mathbf{x})$ verwendet wurde. In manchen Fällen ist die Korrelationsfunktion aber durch deren Fouriertransformierte $R(\mathbf{k})$ gegeben,

$$R(\mathbf{x}) = \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} R(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}. \quad (3.53)$$

Für diesen Fall schreibt man nun die Gleichung für die Korrektur des großkanonischen Potentials (3.52) so um, dass man die Fouriertransformierte einsetzen kann. Mit der Fouriertransformierten (3.53) ist dann die Formel für die Korrektur des großkanonischen Potentials (3.52) gleichbedeutend mit

$$\begin{aligned} \Omega^{(1)} &= V \sum_{n=1}^{\infty} e^{\beta n \mu} \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} R(\mathbf{k}) \lim_{\epsilon \searrow 0} \text{Im} \int_0^{\infty} d\tau e^{-\epsilon \tau} \left(\frac{M}{2\pi \hbar^2} \right)^D \frac{1}{(\tau(\tau + i\beta n))^{D/2}} \\ &\quad \int d^D x \exp \left\{ -\frac{M}{2\hbar^2} \left[\frac{1}{i\tau} + \frac{1}{\beta n - i\tau} \right] \mathbf{x}^2 + i\mathbf{k}\mathbf{x} \right\}. \end{aligned} \quad (3.54)$$

Das \mathbf{x} -Integral ist ein einfaches Gaußintegral und lässt sich berechnen. Man erhält

$$\Omega^{(1)} = V \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{\beta n \mu}}{n^{D/2}} \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} R(\mathbf{k}) \lim_{\epsilon \searrow 0} \text{Im} \int_0^{\infty} d\tau e^{-\epsilon \tau} \left(\frac{M}{2\pi \hbar^2 \beta} \right)^{D/2} \exp \left\{ -\frac{\hbar^2}{2M\beta n} (\tau^2 + i\beta n \tau) \mathbf{k}^2 \right\}. \quad (3.55)$$

3.5.1 Gauß-Korrelation

Nun wird auf den Fall einer Gaußschen Unordnungskorrelation spezialisiert:

$$R(\mathbf{x}) = \frac{R}{(2\pi \xi^2)^{D/2}} e^{-\frac{\mathbf{x}^2}{2\xi^2}}. \quad (3.56)$$

Einsetzen in die Formel für die Korrektur des großkanonischen Potentials (3.52) liefert

$$\begin{aligned} \Omega^{(1)} &= V \sum_{n=1}^{\infty} e^{\beta n \mu} \lim_{\epsilon \searrow 0} \text{Im} \int_0^{\infty} d\tau e^{-\epsilon \tau} \left(\frac{M}{2\pi \hbar^2} \right)^D \int d^D x \frac{R}{(2\pi \xi^2)^{D/2}} \frac{1}{[\tau(\tau + i\beta n)]^{D/2}} \\ &\quad \exp \left\{ -\left[\frac{\beta M n}{2\hbar^2} \frac{1}{\tau^2 + i\beta n \tau} + \frac{1}{2\xi^2} \right] \mathbf{x}^2 \right\}. \end{aligned} \quad (3.57)$$

Das \mathbf{x} -Integral ist nun ebenfalls ein Gaußintegral, und man erhält

$$\Omega^{(1)} = V \sum_{n=1}^{\infty} e^{\beta n \mu} \left(\frac{M}{2\pi \hbar^2} \right)^D \lim_{\epsilon \searrow 0} \text{Im} \int_0^{\infty} d\tau e^{-\epsilon \tau} R \left[\frac{\hbar^2}{\hbar^2(\tau^2 + i\beta n \tau) + \xi^2 \beta M n} \right]^{D/2}. \quad (3.58)$$

Nach Grenzübergang $\epsilon \rightarrow 0$ lässt sich dieses Integral in $D = 3$ Dimensionen berechnen [34, (2.264.5)]. Sorgfältige Auswertung an den Integrationsgrenzen liefert das Ergebnis

$$\Omega^{(1)} = V \sum_{n=1}^{\infty} e^{\beta n \mu} \left(\frac{M}{2\pi \hbar^2} \right)^3 \text{Im} R \hbar^3 \left[\frac{4}{4\xi^2 M \beta n \hbar + \hbar^3 \beta^2 n^2} - \frac{2i}{(4\xi^2 M + \hbar^2 \beta n) \sqrt{\xi^2 M \beta n}} \right]. \quad (3.59)$$

Damit ist die Korrektur zum großkanonischen Potential in erster Ordnung in R unter Verwendung der thermischen de-Broglie-Wellenlänge berechnet zu

$$\Omega^{(1)} = -V \frac{R\beta}{2(2\pi)^{3/2} \xi \lambda^3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{n\beta\mu}}{\sqrt{n} \left(\xi^2 + \frac{\hbar^2 \beta n}{4M} \right)}. \quad (3.60)$$

Es ist zu beachten, dass hier $\mu \leq 0$ gilt, was im Fall des freien Bose-Gases auch garantiert ist. Für $\xi \rightarrow 0$ ist dieser Term divergent, aber in allen physikalischen Größen verschwindet diese Divergenz, was insbesondere für die Teilchendichte noch gezeigt wird. Mit Falle wird dies unter Benutzung der semiklassischen Näherung

$$\Omega^{(1)} = - \int d^D x \frac{R\beta}{2(2\pi)^{3/2} \xi \lambda^3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{n\beta[\mu-U(\mathbf{x})]}}{\sqrt{n} \left(\xi^2 + \frac{\hbar^2 \beta n}{4M} \right)}. \quad (3.61)$$

Die n -Summe konvergiert offenbar nur für $\mu \leq U(\mathbf{x})$. Dies legt das maximale chemische Potential als dasjenige fest, bei dem es das minimale Fallenpotential erreicht. Insbesondere legt dies auch die Ausdehnung der Gaswolke fest.

In Analogie zu Abschnitt 3.4.2 ergibt sich dann für das ideale Bose-Gas in einer anisotropen harmonischen Falle bei Annahme einer Gaußschen Korrelation die Korrektur des großkanonischen Potentials in 1. Ordnung in R aus (3.61) zu

$$\Omega^{(1)} = - \frac{R\beta}{2(2\pi)^{3/2} \xi (\hbar\beta\tilde{\omega})^3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{n\beta\mu}}{n^2 \left(\xi^2 + \frac{\hbar^2 \beta n}{4M} \right)}, \quad (3.62)$$

falls $\mu \leq 0$.

3.5.2 Lorentz-Korrelation

In diesem Abschnitt wird auf eine Lorentz-Unordnungskorrelation spezialisiert. Sie ist im \mathbf{k} -Raum definiert durch

$$R(\mathbf{k}) = \frac{R}{1 + \xi^2 \mathbf{k}^2}. \quad (3.63)$$

Man setzt dies nun in die modifizierte Formel für die Korrektur des großkanonischen Potentials (3.55) explizit ein und erhält

$$\Omega^{(1)} = V \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{\beta n \mu}}{n^{D/2}} \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{R}{1 + \xi^2 \mathbf{k}^2} \lim_{\epsilon \searrow 0} \text{Im} \int_0^{\infty} d\tau e^{-\epsilon\tau} \left(\frac{M}{2\pi \hbar^2 \beta} \right)^{D/2} \exp \left\{ - \frac{\hbar^2}{2M\beta n} (\tau^2 + i\beta n \tau) \mathbf{k}^2 \right\}. \quad (3.64)$$

Man benutzt nun den Schwinger-Trick (3.26), um den \mathbf{k} -behafteten Nenner in den Exponenten zu befördern.

$$\begin{aligned} \Omega^{(1)} &= RV \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{\beta n \mu}}{n^{D/2}} \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \lim_{\epsilon \searrow 0} \text{Im} \int_0^{\infty} d\tau e^{-\epsilon\tau} \left(\frac{M}{2\pi \hbar^2 \beta} \right)^{D/2} \\ &\quad \int_0^{\infty} d\sigma e^{-\sigma} \exp \left\{ - \left[\frac{\hbar^2}{2M\beta n} (\tau^2 + i\beta n \tau) + \sigma \xi^2 \right] \mathbf{k}^2 \right\}. \end{aligned} \quad (3.65)$$

Nun lässt sich das \mathbf{k} -Integral berechnen. Anschließend fasst man einige Terme zusammen.

$$\Omega^{(1)} = \frac{RV}{(2\pi)^D} \sum_{n=1}^{\infty} e^{\beta n \mu} \lim_{\epsilon \searrow 0} \text{Im} \int_0^{\infty} d\tau e^{-\epsilon\tau} \frac{M^D}{\hbar^{2D}} \int_0^{\infty} d\sigma e^{-\sigma} \frac{1}{\left(\tau^2 + i\beta n \tau + \frac{2M\beta n}{\hbar^2} \xi^2 \sigma \right)^{D/2}}. \quad (3.66)$$

In $D = 3$ Dimensionen benutzt man nun erneut [34, (2.264.5)], und berechnet so nach Grenzübergang $\epsilon \rightarrow 0$ das τ -Integral:

$$\Omega^{(1)} = \frac{RV}{(2\pi)^3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{\beta n \mu}}{n} \frac{M^2}{4\hbar^4 \beta} \int_0^{\infty} d\sigma e^{-\sigma} \frac{1}{\xi^2 \sigma + \frac{\hbar^2}{8M} \beta n} \text{Im} \left[2 - \frac{i\beta n \hbar}{\sqrt{2M\beta n \xi^2 \sigma}} \right]. \quad (3.67)$$

Offenbar ist dies

$$\Omega^{(1)} = -\frac{RV}{(2\pi)^3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{\beta n \mu}}{\sqrt{n}} \frac{M^{3/2}}{4\sqrt{2}\hbar^3\sqrt{\beta}} \frac{1}{\xi^3} \int_0^{\infty} d\sigma \sigma^{-1/2} \frac{1}{\sigma + \frac{\hbar^2}{8M\xi^2}\beta n} e^{-\sigma}. \quad (3.68)$$

Dieses Integral lässt sich mit Gradshteyn [34, (3.383.7)] unter Beachtung von [34, (9.254.1)] berechnen, und das Ergebnis lautet

$$\Omega^{(1)} = -\frac{RV}{(2\pi)^3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{\beta n \mu}}{n} \frac{\pi M^2}{2\hbar^4\beta\xi^2} \exp\left[\frac{\hbar^2\beta n}{8M\xi^2}\right] \left\{ 1 - \Phi\left(\sqrt{\frac{\hbar^2\beta n}{8M\xi^2}}\right) \right\}. \quad (3.69)$$

Dabei ist $\Phi(x)$ das Wahrscheinlichkeitsintegral

$$\Phi(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x dt e^{-t^2}. \quad (3.70)$$

Damit ist die Korrektur zum großkanonischen Potential auch für die Lorentz-Korrelation berechnet.

Benutzung der Gradshteyn-Formel [34, (8.254)] liefert die Erkenntnis, dass diese Summe für endliches ξ und $\mu \leq 0$ konvergiert, denn es gilt für große y die asymptotische Entwicklung

$$e^y [1 - \Phi(\sqrt{y})] = \frac{1}{\sqrt{\pi y}} - \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \frac{1}{y^{3/2}} + \dots \quad (3.71)$$

Hierbei ist zu beachten, dass die Reihenentwicklung (3.71) keine konvergente Reihe liefert. Sie besitzt jedoch ein endliches Restglied, dessen Maximum abgeschätzt werden kann. Außerdem gilt auch hier, dass Divergenzen für $\xi \rightarrow 0$ nur scheinbar auftreten. Mit Falle erhält man in semiklassischer Näherung

$$\Omega^{(1)} = -\int d^D x \frac{R}{(2\pi)^3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{\beta n [\mu - U(\mathbf{x})]}}{n} \frac{\pi M^2}{2\hbar^4\beta\xi^2} \exp\left[\frac{\hbar^2\beta n}{8M\xi^2}\right] \left\{ 1 - \Phi\left(\sqrt{\frac{\hbar^2\beta n}{8M\xi^2}}\right) \right\}. \quad (3.72)$$

Benutzung der asymptotischen Entwicklung (3.71) liefert die Erkenntnis, dass diese Summe für endliches ξ und $\mu \leq U(\mathbf{x})$ konvergiert.

Auch hier geht man nun analog zu Abschnitt 3.4.2 vor, und man erhält für das ideale Bose-Gas in einer anisotropen harmonischen Falle bei Annahme einer Lorentz-Korrelation die Korrektur des großkanonischen Potentials in 1. Ordnung in R aus (3.72) zu

$$\Omega^{(1)} = -\frac{R}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{\beta n \mu}}{n^{5/2}} \frac{\pi\sqrt{M\beta}}{2\hbar\xi^2} \frac{1}{(\hbar\beta\tilde{\omega})^3} \exp\left[\frac{\hbar^2\beta n}{8M\xi^2}\right] \left\{ 1 - \Phi\left(\sqrt{\frac{\hbar^2\beta n}{8M\xi^2}}\right) \right\}. \quad (3.73)$$

Diese Reihe ist konvergent für $\mu \leq 0$.

3.6 Selbstenergie und renormiertes chemisches Potential

Bekanntlich tritt der Phasenübergang von der Gasphase in die Kondensatphase an der Stelle auf, an der die Green-sche Funktion divergiert. Die Unordnung verändert das kritische chemische Potential, für das diese Divergenz auftritt. Diese Störung kann durch die Selbstenergie ausgedrückt werden. Im Folgenden wird daher über die Selbstenergie das kritische chemische Potential berechnet.

3.6.1 Definition der Selbstenergie und des renormierten chemischen Potentials

Zunächst betrachte man die Definition des Inversen der Greenschen Funktion, welches in diesem Zusammenhang synonym auch als Integrkern bezeichnet wird.

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x G^{-1}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}, \tau) G(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}_2, \tau_2) = \hbar \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \delta(\tau_1 - \tau_2). \quad (3.74)$$

Bei Annahme eines wechselwirkungsfreien Gases ($g = 0$) ohne Unordnung ($R = 0$) ist dann

$$G^{-1}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) = G^{(0)-1}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2). \quad (3.75)$$

Mit Unordnung und Wechselwirkung definiert man (vgl. [31, (9.31)])

$$G^{-1}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) = G^{(0)-1}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) - \hbar \Sigma(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2). \quad (3.76)$$

Hierbei ist nun Σ die erwähnte Selbstenergie. Im Folgenden wird erneut verwendet, dass ohne Wechselwirkung gearbeitet wird ($g = 0$).

Setzt man (3.76) in (3.74) ein, so erhält man die Dyson-Gleichung [31, (20.20)]

$$\begin{aligned} G(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) &= G^{(0)}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) + \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x \int d^D x' \\ &G^{(0)}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}, \tau) \Sigma(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') G(\mathbf{x}', \tau'; \mathbf{x}_2, \tau_2). \end{aligned} \quad (3.77)$$

Man möchte nun die Stelle des Phasenübergangs bestimmen. An dieser Stelle divergiert die Korrelationsfunktion. Insbesondere gilt also für das funktionale Inverse der Greenschen Funktion, den Integrkern, dass es an dieser Stelle verschwinden muss. Kommt man von hohen Temperaturen, d.h. μ ist stark negativ, so geschieht dies bei Beachtung einer Falle an der Stelle, an welcher das effektive chemische Potential, in welchem sich das Teilchen bewegt,

$$-\mu_{\text{eff}}(\mathbf{x}, \mu) = G^{-1}(\mathbf{k} = \mathbf{0}, \omega_m = 0; \mathbf{x}), \quad (3.78)$$

räumlich gesehen sein Maximum hat. $G^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m; \mathbf{x})$ ist hierbei der Integrkern mit der Substitution $\mu \rightarrow \mu - U(\mathbf{x})$, wobei $U(\mathbf{x})$ das Fallenpotential ist. Das entspricht der Behandlung der Falle in der lokalen Dichte-Näherung, wie in Abschnitt 3.3 erwähnt. Hierbei ist zu beachten, dass sich die räumliche Fouriertransformation nur auf die Relativkoordinate $\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$ bezieht, und nicht auf die Schwerpunktskoordinate $(\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2)/2$. Ohne Falle würde das effektive chemische Potential am Phasenübergang lediglich verschwinden, d.h.

$$\mu_{\text{eff}}(\mu) = 0. \quad (\text{ohne Falle}) \quad (3.79)$$

Dies entspricht der Divergenz der Greenschen Funktion. Der Grund dafür, dass das effektive chemische Potential mit Falle räumlich maximiert wird, liegt ebenfalls an der Divergenz der Greenschen Funktion an der Phasengrenze. Insbesondere heißt das

$$\frac{\partial \mu_{\text{eff}}(\mathbf{x}, \mu)}{\partial \mathbf{x}} = 0. \quad (\text{mit Falle}) \quad (3.80)$$

Die Fourier-Matsubara-Transformierte einer Funktion ist in (3.6) definiert. Die des Integrkerns ist damit definiert durch

$$G^{-1}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2, \tau_1 - \tau_2; \mathbf{x}) = \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_m(\tau_1 - \tau_2)} \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)} G^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m; \mathbf{x}). \quad (3.81)$$

Man beachte, dass die Ortsabhängigkeit des Potentials $U(\mathbf{x})$, welche durch das letzte, durch ein Semikolon abgetrennte \mathbf{x} , dargestellt wird, auch in $G^{-1}(\mathbf{p}, \omega_m; \mathbf{x})$ noch vorhanden ist. Diese wird also nicht mittransformiert, da sich die Fouriertransformation nur auf die Relativkoordinate $\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$ bezieht! Die Fourier-Matsubara-Transformierte der Selbstenergie ist analog definiert:

$$\Sigma(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2, \tau_1 - \tau_2; \mathbf{x}) = \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_m(\tau_1 - \tau_2)} \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)} \Sigma(\mathbf{k}, \omega_m; \mathbf{x}). \quad (3.82)$$

Damit folgt für $G^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m; \mathbf{x})$ nach Definition der Selbstenergie (3.76)

$$G^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m; \mathbf{x}) = \left\{ -i\hbar\omega_m + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} + U(\mathbf{x}) - \mu \right\} - \hbar\Sigma(\mathbf{k}, \omega_m; \mathbf{x}). \quad (3.83)$$

Hieraus folgt im Falle des homogenen, idealen Bose-Gases, da $\Sigma(\mathbf{k}, \omega_m; \mathbf{x}) = 0$ ist, sofort $\mu_c = 0$, was bekanntermaßen den richtigen Wert des kritischen chemischen Potentials, d.h. des chemischen Potentials am Phasenübergang liefert.

Nach Definition der Greenschen Funktion bzw. deren Inversen (3.74) folgt damit für den Zusammenhang zwischen den Fourier-Matsubara-Transformierten

$$G(\mathbf{k}, \omega_m; \mathbf{x}) = \frac{\hbar}{G^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m; \mathbf{x})}. \quad (3.84)$$

Der Phasenübergang taucht wie erwähnt (3.78) an der Stelle auf, an der das effektive chemische Potential extremal ist (3.80) bzw. verschwindet (3.79). Aus der Extremalbedingung (3.80) folgt ein Wert für \mathbf{x} , der als \mathbf{x}_{\min} bezeichnet wird, da er offenbar das räumliche Minimum der Falle bezeichnet.

Dann folgt aber für den Zusammenhang zwischen Selbstenergie und chemischem Potential am Phasenübergang aus der Bedingung des Verschwindens des transformierten Integrkerns (3.83) bei $\omega_m = 0$, $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ sofort

$$0 = \mu_c + \hbar\Sigma(\mathbf{k} = \mathbf{0}, \omega_m = 0; \mathbf{x} = \mathbf{x}_{\min}) - U(\mathbf{x}_{\min}). \quad (3.85)$$

Der Phasenübergang geschieht also ohne Selbstenergie an der Stelle, an der das chemische Potential μ das Minimum der Falle erreicht. Wenn man ohne Falle und Unordnung rechnet, muss μ bekanntlich 0 erreichen. μ geht an der Phasengrenze also gegen einen kritischen Wert

$$\mu_c = -\hbar\Sigma(\mathbf{k} = \mathbf{0}, \omega_m = 0; \mathbf{x} = \mathbf{x}_{\min}) + U(\mathbf{x}_{\min}). \quad (3.86)$$

Mit der Definition

$$\mu_r = \mu - \mu_c \quad (3.87)$$

für das renormierte chemische Potential folgt sofort, dass dieses am Phasenübergang verschwindet, d.h. der Phasenübergang geschieht für $\mu \nearrow \mu_c$, was analog ist zu $\mu_r \nearrow 0$.

Eingesetzt folgt für das renormierte chemische Potential:

$$\mu_r = \mu + \hbar\Sigma(\mathbf{k} = \mathbf{0}, \omega_m = 0; \mathbf{x} = \mathbf{x}_{\min}) - U(\mathbf{x}_{\min}). \quad (3.88)$$

Falls man ohne Falle rechnet, so hat die transformierte Selbstenergie keine explizite Ortsabhängigkeit. Folglich kann dann auf das letzte Argument in der Selbstenergie im obigen Ausdruck verzichtet werden.

3.6.2 Störungsreihe für die Greensche Funktion

Die Greensche Funktion in einem Zufallspotential ist bei Betrachtung der Unordnung offenbar das Unordnungsmittel der normalen Greenschen Funktion, d.h.

$$G(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) = \overline{\frac{1}{\mathcal{Z}} \oint \mathcal{D}\psi \oint \mathcal{D}\psi^* \psi(\mathbf{x}_1, \tau_1) \psi^*(\mathbf{x}_2, \tau_2) e^{-\mathcal{A}[\psi^*, \psi]/\hbar}}. \quad (3.89)$$

Um diesen Mittelwert berechnen zu können, ist es sinnvoll, erneut die Replika-Methode zu verwenden. Daher wird $\psi(\mathbf{x}_1, \tau_1) \psi^*(\mathbf{x}_2, \tau_2)$ mit $\psi_\alpha(\mathbf{x}_1, \tau_1) \psi_\alpha^*(\mathbf{x}_2, \tau_2)$ identifiziert, und es werden weitere $N - 1$ solcher Kombinationen von Bose-Feldern eingeführt, sodass der Erwartungswert lautet

$$G(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) = \overline{\frac{1}{\mathcal{Z}^N} \left\{ \prod_{\alpha'=1}^N \oint \mathcal{D}\psi_{\alpha'} \oint \mathcal{D}\psi_{\alpha'}^* \right\} \psi_\alpha(\mathbf{x}_1, \tau_1) \psi_\alpha^*(\mathbf{x}_2, \tau_2) \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \sum_{\alpha'=1}^N \mathcal{A}[\psi_{\alpha'}^*, \psi_{\alpha'}] \right\}}. \quad (3.90)$$

Da die rechte Seite wie die linke Seite vom Replika-Index α unabhängig ist, erhält man im Replika-Limes $N \rightarrow 0$

$$G(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) = \lim_{N \rightarrow 0} \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N \overline{\frac{1}{\mathcal{Z}^N} \left\{ \prod_{\alpha'=1}^N \oint \mathcal{D}\psi_{\alpha'} \oint \mathcal{D}\psi_{\alpha'}^* \right\} \psi_\alpha(\mathbf{x}_1, \tau_1) \psi_\alpha^*(\mathbf{x}_2, \tau_2) \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \sum_{\alpha'=1}^N \mathcal{A}[\psi_{\alpha'}^*, \psi_{\alpha'}] \right\}}. \quad (3.91)$$

Die Unordnungsmittelung kann nun durchgeführt werden, und das Ergebnis lautet

$$G(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) = \lim_{N \rightarrow 0} \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N \frac{1}{\mathcal{Z}^N} \left\{ \prod_{\alpha'=1}^N \oint \mathcal{D}\psi_{\alpha'} \oint \mathcal{D}\psi_{\alpha'}^* \right\} \psi_\alpha(\mathbf{x}_1, \tau_1) \psi_\alpha^*(\mathbf{x}_2, \tau_2) e^{-\mathcal{A}^N[\psi^*, \psi]/\hbar}. \quad (3.92)$$

Hierbei stellt $\mathcal{A}^N[\psi^*, \psi]$ die Replika-Wirkung dar, die mittels

$$\mathcal{A}^N[\psi^*, \psi] = \mathcal{A}^{(0)}[\psi^*, \psi] + \mathcal{A}^{(\text{int})}[\psi^*, \psi] + \mathcal{A}^{(\text{u})}[\psi^*, \psi] \quad (3.93)$$

definiert ist, wobei die einzelnen Teilwirkungen, (2.47), (2.50) und (2.52), schon in Kapitel 2 hergeleitet worden sind. Um die Greensche Funktion (3.92) berechnen zu können, führt man das erzeugende Funktional

$$\overline{\mathcal{Z}[j^*, j]} = \left\{ \prod_{\alpha=1}^N \oint \mathcal{D}\psi_\alpha^* \oint \mathcal{D}\psi_\alpha \right\} e^{-\mathcal{A}^N[\psi^*, \psi, j^*, j]/\hbar} \quad (3.94)$$

ein. Jedes Bose-Feld $\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau)$, $\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau)$ wird hierbei an ein zugehöriges Stromfeld $j_\alpha(\mathbf{x}, \tau)$, $j_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau)$ gekoppelt, mittels der Wirkung

$$\mathcal{A}^N[\psi^*, \psi, j^*, j] = \mathcal{A}^N[\psi^*, \psi] - \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \sum_{\alpha=1}^N \{ j_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) + \psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) j_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \}. \quad (3.95)$$

Durch funktionale Ableitung nach den Strömen erhält man so die Greensche Funktion:

$$G(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) = \lim_{N \rightarrow 0} \frac{\hbar^2}{N} \sum_{\alpha=1}^N \frac{\delta^2 \overline{\mathcal{Z}[j^*, j]}}{\delta j_\alpha^*(\mathbf{x}_1, \tau_1) \delta j_\alpha(\mathbf{x}_2, \tau_2)} \Bigg|_{j(\mathbf{x}, \tau)=0}^{j^*(\mathbf{x}, \tau)=0}. \quad (3.96)$$

Möchte man die Greensche Funktion jetzt störungstheoretisch behandeln, so braucht man noch zwei weitere Feynman-Regeln, die die Ströme berücksichtigen:

- Konjugierter Strom:

$$\mathbf{x} \longleftarrow 1 \quad \equiv \quad j_{\alpha_1}^*(\mathbf{x}_1, \tau_1), \quad (3.97)$$

- Strom:

$$1 \longrightarrow x \equiv j_{\alpha_1}(\mathbf{x}_1, \tau_1). \quad (3.98)$$

Für die in den Strömen quadratischen Beiträge zur Zustandssumme treten neben den stromlosen Schleifen nun auch Schleifen mit zwei Strömen auf:

$$x \longleftarrow \begin{array}{c} 1 \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \begin{array}{c} 2 \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \cdots \begin{array}{c} M-1 \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \begin{array}{c} M \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} x \propto \sum_{\alpha_1=1}^N \sum_{\alpha_2=1}^N \cdots \sum_{\alpha_{M-1}=1}^N \sum_{\alpha_M=1}^N \delta_{\alpha_1 \alpha_2} \cdots \delta_{\alpha_{M-1} \alpha_M} = N. \quad (3.99)$$

Die in den Strömen quadratischen Beiträge zum großkanonischen Potential liefern also ebenfalls einen Faktor N , genau wie die Diagramme, welche eine einzelne Schleife zwischen den u-Vertizes enthalten. Daher ist es sofort möglich zu entscheiden, welche Diagramme im Replika-Grenzfall $N \rightarrow 0$ übrig bleiben. Es sind dies die Diagramme mit genau einer strombehafteten Schleife, und ohne weitere Schleifen. Damit folgt für die Störungsreihe in R für die Greensche Funktion, wenn man die Wechselwirkung nicht beachtet,

$$G = G^{(0)} + 2 \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} + \cdots. \quad (3.100)$$

Daraus liest man die Greensche Funktion bis zur ersten Ordnung in R ab:

$$G(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) = G^{(0)}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) + \frac{1}{\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x \int d^D x' R(\mathbf{x} - \mathbf{x}') G^{(0)}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}, \tau) G^{(0)}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') G^{(0)}(\mathbf{x}', \tau'; \mathbf{x}_2, \tau_2) + \cdots. \quad (3.101)$$

Durch Iteration der Dyson-Gleichung (3.77), indem man immer wieder die Greensche Funktion auf der rechten Seite von Gleichung (3.77) einsetzt, erhält man die Dyson-Reihe für die Greensche Funktion. Im Vergleich mit der Störungstheorie 1. Ordnung in R , also mit Gleichung (3.101), sieht man, dass man auch die Selbstenergie nach R entwickeln kann. Ein Vergleich der beiden Gleichungen liefert

$$\Sigma(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) = \frac{1}{\hbar^2} R(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) G^{(0)}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) + \cdots. \quad (3.102)$$

3.6.3 Berechnung des renormierten chemischen Potentials

Nachdem die Notwendigkeit erläutert wurde, ein renormiertes chemisches Potential einzuführen, folgt nun dessen Berechnung. Zunächst wird die Fourier-Matsubara-Transformierte der Selbstenergie berechnet.

$$\Sigma(\mathbf{k}, \omega_m) = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x e^{i\omega_m \tau} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} \Sigma(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{0}, 0). \quad (3.103)$$

Einsetzen des störungstheoretischen Ergebnisses für die Selbstenergie (3.102) mit Benutzung der ungestörten Greenschen Funktion (3.8) führt auf die Gleichung

$$\Sigma(\mathbf{k}_1, \omega_{m_1}) = \frac{1}{\hbar^2 \beta} \int d^D x \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int \frac{d^D k_2}{(2\pi)^D} \sum_{m_2=-\infty}^{\infty} R(\mathbf{x}) \frac{e^{i\mathbf{x}(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1)} e^{i\tau(\omega_{m_1} - \omega_{m_2})}}{-i\hbar\omega_{m_2} + \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}_2^2}{2M} - \mu\right)}. \quad (3.104)$$

Die Integration über τ liefert nur einen Beitrag für $m_1 = m_2$. Damit lässt sich auch die m -Summe durchführen:

$$\Sigma(\mathbf{k}_1, \omega_m) = \frac{1}{\hbar} \int d^D x \int \frac{d^D k_2}{(2\pi)^D} R(\mathbf{x}) \frac{e^{i\mathbf{x}(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1)}}{-i\hbar\omega_m + \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}_2^2}{2M} - \mu\right)}. \quad (3.105)$$

Zur Berechnung des \mathbf{k}_2 -Integrals verwendet man erneut den Schwinger-Trick (3.26). Dies liefert das Integral

$$\Sigma(\mathbf{k}_1, \omega_m) = \frac{1}{\hbar} \int d^D x \int \frac{d^D k_2}{(2\pi)^D} \int_0^\infty d\sigma R(\mathbf{x}) e^{-\sigma \left(-i\hbar\omega_m + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_2^2}{2M} - \mu \right)} e^{i\mathbf{x}(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1)}. \quad (3.106)$$

Das Integral über \mathbf{k}_2 ist nun ein Gaußintegral. Das Ergebnis lautet

$$\Sigma(\mathbf{k}, \omega_m) = \frac{1}{\hbar} \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2} \right)^{D/2} \int d^D x R(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} \int_0^\infty d\sigma \sigma^{-D/2} \exp \left\{ -\sigma \left(-i\hbar\omega_m - \mu \right) - \frac{\mathbf{x}^2 M}{2\sigma\hbar^2} \right\}. \quad (3.107)$$

Dieses Integral ist trotz des negativen Exponenten vor der Exponentialfunktion nicht divergent, da diese ein inverses σ im Exponenten stehen hat. Mittels Gradshteyn [34, (3.471.9)] und [34, (8.469.3)] lässt sich dieses Integral in $D = 3$ Dimensionen berechnen. Die Voraussetzungen sind hier erfüllt. Das Ergebnis lautet

$$\Sigma(\mathbf{k}, \omega_m) = \frac{1}{\hbar} \frac{M}{2\pi\hbar^2} \int d^3 x \frac{R(\mathbf{x})}{|\mathbf{x}|} \exp \left\{ -2\sqrt{\frac{M}{2\hbar^2}} (-\mu - i\hbar\omega_m) |\mathbf{x}| - i\mathbf{k}\mathbf{x} \right\}. \quad (3.108)$$

An dieser Stelle führt man nun zwei Vereinfachungen durch: Zum einen soll das Integral nur für $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ und $\omega_m = 0$ berechnet werden, zum anderen sei räumliche Isotropie angenommen. Damit ergibt sich für das Integral

$$\Sigma(\mathbf{k} = \mathbf{0}, \omega_m = 0) = \frac{2M}{\hbar^3} \int_0^\infty dx x R(x) \exp \left\{ -2x \sqrt{\frac{M}{2\hbar^2}} (-\mu) \right\}. \quad (3.109)$$

Da die Selbstenergie für jede beliebige isotrope Korrelation des Zufallspotentials $R(x)$ positiv ist, ist das chemische Potential ohne Falle nach dem Ergebnis für das kritische chemische Potential (3.86) stets negativ, da es bereits vor dem Erreichen von $\mu = 0$ zum Phasenübergang kommt.

3.6.4 Gauß-Korrelation

Nun spezialisiert man auf den Fall einer Gaußschen Korrelation (3.56). Das entstehende Integral ist

$$\Sigma(\mathbf{k} = \mathbf{0}, \omega_m = 0) = \frac{2MR}{(2\pi\hbar^3\xi^2)^{3/2}} \int_0^\infty dx x \exp \left\{ -\frac{x^2}{2\xi^2} - 2x \sqrt{\frac{M}{2\hbar^2}} (-\mu) \right\}. \quad (3.110)$$

Dieses Integral lässt sich mittels [34, (3.462.5)] ebenfalls berechnen, und das Ergebnis lautet

$$\Sigma(\mathbf{k} = \mathbf{0}, \omega_m = 0) = \frac{2M}{\hbar^3} R \left\{ \frac{1}{(2\pi)^{3/2}\xi} - \frac{\sqrt{-\frac{M}{2\hbar^2}}\mu}{2\pi} e^{-\frac{M}{\hbar^2}\mu\xi^2} \left[1 - \Phi \left(\sqrt{-\frac{M}{\hbar^2}}\mu\xi^2 \right) \right] \right\}. \quad (3.111)$$

$\Phi(x)$ ist wiederum das Wahrscheinlichkeitsintegral (3.70). Nun kann man das renormierte chemische Potential nach dessen Definition (3.88) bei Annahme einer Gaußschen Korrelation hinschreiben, wobei die Falle in lokaler Dichte-Näherung berücksichtigt wird:

$$\begin{aligned} \mu_r &= \mu - U(\mathbf{x}_{\min}) + \frac{2M}{(2\pi)^{3/2}\hbar^2\xi} R \\ &\quad - \frac{M}{\pi\hbar^2} R \sqrt{\frac{M}{2\hbar^2}} [U(\mathbf{x}_{\min}) - \mu] e^{\frac{M}{\hbar^2}[U(\mathbf{x}_{\min}) - \mu]\xi^2} \left[1 - \Phi \left(\sqrt{\frac{M}{\hbar^2}} [U(\mathbf{x}_{\min}) - \mu]\xi^2 \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.112)$$

Damit ist μ_r im Falle der Gaußschen Korrelation berechnet. Das kritische chemische Potential ist bei einer Entwicklung nach R bis zur ersten Ordnung nach (3.86)

$$\mu_c = U(\mathbf{x}_{\min}) - \frac{2M}{(2\pi)^{3/2}\hbar^2\xi} R. \quad (3.113)$$

Ohne Falle ist es offenbar negativ. Entwickelt man μ mit Hilfe von Gleichung (3.112) um μ_r bis zur ersten Ordnung in R , so erhält man

$$\begin{aligned} \mu = & \mu_r + U(\mathbf{x}_{\min}) - \frac{2M}{(2\pi)^{3/2} \hbar^2 \xi} R \\ & + \frac{M}{\pi \hbar^2} R \sqrt{-\frac{M}{2\hbar^2} \mu_r} e^{-\frac{M}{\hbar^2} \xi^2 \mu_r} \left[1 - \Phi \left(\sqrt{-\frac{M}{\hbar^2} \xi^2 \mu_r} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.114)$$

3.6.5 Lorentz-Korrelation

Nun wird auf den Fall einer Lorentz-Korrelation (3.63) spezialisiert. Zunächst soll die Fouriertransformierte des Ausdrucks berechnet werden. Es ist

$$R(\mathbf{x}) = \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} R(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}. \quad (3.115)$$

Setzt man $R(\mathbf{k})$ im Lorentz-Fall (3.63) dort ein, und schreibt den Ausdruck in $D = 3$ Dimensionen in Kugelkoordinaten, so erhält man

$$R(\mathbf{x}) = \frac{R}{(2\pi)^3} \int_0^\infty dk \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi k^2 \sin(\theta) \frac{1}{1 + \xi^2 k^2} e^{ikx \cos(\theta)}, \quad (3.116)$$

mit $k = |\mathbf{k}|$ und $x = |\mathbf{x}|$. Die Integrale über die Winkel lassen sich durch Substitution durchführen, und man erhält

$$R(\mathbf{x}) = \frac{R}{2\pi^2 x} \int_0^\infty dk \frac{k}{1 + \xi^2 k^2} \sin(kx). \quad (3.117)$$

Diese Integral berechnet sich nach Gradshteyn [34, (3.723.3)] zu

$$R(\mathbf{x}) = R(x) = \frac{R}{4\pi \xi^2} \frac{1}{x} e^{-\frac{x}{\xi}}. \quad (3.118)$$

Diesen Ausdruck setzt man nun in den Ausdruck für die Selbstenergie (3.109) ein:

$$\Sigma(\mathbf{k} = \mathbf{0}, \omega_m = 0) = \frac{MR}{2\pi \hbar^3 \xi^2} \int_0^\infty dx \exp \left\{ -x \left(\frac{1}{\xi} + 2\sqrt{\frac{M}{2\hbar^2} (-\mu)} \right) \right\}. \quad (3.119)$$

Integration ergibt somit

$$\Sigma(\mathbf{k} = \mathbf{0}, \omega_m = 0) = \frac{MR}{2\pi \hbar^3 \xi} \frac{1}{1 + 2\xi \sqrt{-\frac{M}{2\hbar^2} \mu}}. \quad (3.120)$$

Das renormierte chemische Potential im Falle der Lorentz-Korrelation ist bei Behandlung der Falle in semiklassischer Näherung nach dessen Bestimmungsgleichung (3.88) damit

$$\mu_r = \mu - U(\mathbf{x}_{\min}) + \frac{MR}{2\pi \hbar^2 \xi} \frac{1}{1 + 2\xi \sqrt{\frac{M}{2\hbar^2} [U(\mathbf{x}_{\min}) - \mu]}}. \quad (3.121)$$

Das kritische chemische Potential ist auch hier bei einer Entwicklung nach R bis zur ersten Ordnung durch (3.86) berechenbar:

$$\mu_c = U(\mathbf{x}_{\min}) - \frac{MR}{2\pi \hbar^2 \xi}. \quad (3.122)$$

Auch hier ist es im Fall des homogenen Bose-Gases negativ. Nun entwickelt man erneut μ um μ_r bis zur ersten Ordnung in R , nun mit Hilfe von Gleichung (3.121), und erhält so

$$\mu = \mu_r + U(\mathbf{x}_{\min}) - \frac{MR}{2\pi \hbar^2 \xi} \frac{1}{1 + 2\xi \sqrt{-\frac{M}{2\hbar^2} \mu_r}}. \quad (3.123)$$

3.7 Verschiebung der kritischen Temperatur

Zunächst wird die Teilchendichte benötigt. Sie ist definiert durch

$$n(T, \mu) = -\frac{1}{V} \frac{\partial \Omega(T, \mu)}{\partial \mu} \Big|_{T, V}. \quad (3.124)$$

Hierbei ist es nach dieser Rechnung sinnvoll, das chemische Potential durch das renormierte Potential zu ersetzen, da dann die Näherungen bei Annäherung an die Phasengrenze besser durchgeführt werden können.

3.7.1 Freies Bose-Gas

Gauß-Korrelation

Für das freie Bose-Gas und bei Annahme einer Gaußschen Unordnungskorrelation ergibt sich nach dem Ergebnis für das ungestörte großkanonische Potential (3.37) und dessen Korrektur bei Annahme einer Gauß-Korrelation (3.60) dessen großkanonisches Potential in $D = 3$ Dimensionen bis zur ersten Ordnung in R zu

$$\Omega = -\frac{V}{\beta \lambda^3} \zeta_{5/2}(e^{\beta \mu}) - V \frac{R \beta}{2(2\pi)^{3/2} \xi \lambda^3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{n \beta \mu}}{\sqrt{n} \left(\xi^2 + \frac{\hbar^2 \beta n}{4M} \right)}. \quad (3.125)$$

Daraus berechnet man die Teilchendichte n mittels der Ableitung (3.124):

$$n = \frac{1}{\lambda^3} \zeta_{3/2}(e^{\beta \mu}) + \frac{R \beta^2}{2(2\pi)^{3/2} \xi \lambda^3} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sqrt{k} e^{k \beta \mu}}{\left(\xi^2 + \frac{\hbar^2 \beta k}{4M} \right)}. \quad (3.126)$$

Nun drückt man μ durch μ_r aus, gemäß (3.114), und erhält

$$\begin{aligned} n &= \frac{1}{\lambda^3} \zeta_{3/2}(e^{\beta \mu_r}) + \frac{R \beta^2}{2(2\pi)^{3/2} \xi \lambda^3} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sqrt{k} e^{k \beta \mu_r}}{\left(\xi^2 + \frac{\hbar^2 \beta k}{4M} \right)} \\ &+ \frac{1}{\lambda^3} \zeta_{1/2}(e^{\beta \mu_r}) \beta \left\{ -\frac{2M}{(2\pi)^{3/2} \hbar^2 \xi} R + \frac{M}{\pi \hbar^2} R \sqrt{\frac{M}{2\hbar^2} (-\mu_r)} e^{\frac{M}{\hbar^2} (-\mu_r) \xi^2} \left[1 - \Phi \left(\sqrt{\frac{M}{\hbar^2} (-\mu_r) \xi^2} \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.127)$$

Dies stellt man um und drückt eine der polylogarithmischen Funktionen $\zeta_{1/2}$ durch die definierende Reihe (3.34) aus:

$$\begin{aligned} n &= \frac{1}{\lambda^3} \zeta_{3/2}(e^{\beta \mu_r}) + \frac{2M \beta}{\lambda^3 (2\pi)^{3/2} \hbar^2 \xi} R \sum_{k=1}^{\infty} e^{k \beta \mu_r} \left[\frac{\sqrt{k}}{\left(\frac{4M}{\hbar^2 \beta} \xi^2 + k \right)} - \frac{1}{\sqrt{k}} \right] \\ &+ \frac{1}{\lambda^3} \zeta_{1/2}(e^{\beta \mu_r}) \frac{M \beta}{\pi \hbar^2} R \sqrt{\frac{M}{2\hbar^2} (-\mu_r)} e^{\frac{M}{\hbar^2} (-\mu_r) \xi^2} \left[1 - \Phi \left(\sqrt{\frac{M}{\hbar^2} (-\mu_r) \xi^2} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.128)$$

An der Phasengrenze geht $\mu \nearrow \mu_c$ bzw. $\mu_r \nearrow 0$. Für die polylogarithmische Funktion $\zeta_{1/2}(e^{\beta \mu_r})$ ist die Robinson-Formel (B.14) zu beachten. An der Phasengrenze erhält man

$$n = \frac{1}{\lambda_c^3} \zeta \left(\frac{3}{2} \right) - \frac{2M \beta_c}{\lambda_c^3 (2\pi)^{3/2} \hbar^2 \xi} R \sum_{k=1}^{\infty} \left[\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{\sqrt{k}}{\left(\frac{4M}{\hbar^2 \beta} \xi^2 + k \right)} \right] + \frac{2\pi R \beta_c^2}{\lambda_c^6}. \quad (3.129)$$

Die auftretende Summe ist hier offenbar konvergent. Für $\xi \rightarrow 0$ verschwindet dieser Term. In der Teilchendichte gibt es also keinen divergierenden Beitrag.

Für $R = 0$ folgt die kritische Temperatur des freien Bose-Gases ohne Unordnung, wenn man die Definition der thermischen de-Broglie-Wellenlänge (3.35) berücksichtigt. Für die kritische Teilchendichte ergibt sich damit

$$n = \frac{1}{\lambda_c^{(0)3}} \zeta\left(\frac{3}{2}\right) = \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2\beta_c^{(0)}}\right)^{3/2} \zeta\left(\frac{3}{2}\right). \quad (3.130)$$

Daraus folgt sofort die ungestörte kritische Temperatur des freien Bose-Gases [26, (3.162)]

$$k_B T_c^{(0)} = \frac{2\pi\hbar^2}{M} \left[\frac{n}{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)} \right]^{2/3}. \quad (3.131)$$

Nun setzt man in die Gleichung für die gestörte kritische Teilchendichte (3.129) $T_c = T_c^{(0)} + \Delta T_c$ ein, und entwickelt bis zur 1. Ordnung in R . So ergibt sich

$$n = \frac{1}{\lambda_c^{(0)3}} \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \left\{ 1 + \frac{3\Delta T_c}{2T_c^{(0)}} \right\} - \frac{2M\beta_c^{(0)}}{\lambda_c^{(0)3} (2\pi)^{3/2} \hbar^2 \xi} R \sum_{k=1}^{\infty} \left[\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{\sqrt{k}}{\left(\frac{4M}{\hbar^2\beta_c^{(0)}} \xi^2 + k\right)} \right] + \frac{2\pi R\beta_c^{(0)2}}{\lambda_c^{(0)6}}. \quad (3.132)$$

$T_c^{(0)}$ und $\lambda_c^{(0)}$ eingesetzt erhält man

$$\frac{\Delta T_c}{T_c^{(0)}} = \frac{4M^2}{3\zeta\left(\frac{3}{2}\right)^{1/3} (2\pi)^{5/2} \hbar^4 \xi} \frac{R}{n^{2/3}} \sum_{k=1}^{\infty} \left[\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{\sqrt{k}}{\left(8\pi(\xi n^{1/3})^2 \zeta\left(\frac{3}{2}\right)^{-2/3} + k\right)} \right] - \frac{M^2}{3\pi\hbar^4 \zeta\left(\frac{3}{2}\right)^{2/3}} \frac{R}{n^{1/3}}. \quad (3.133)$$

Der Grenzübergang $\xi \rightarrow 0$ ist hier wohldefiniert und daher möglich. Man erhält offenbar

$$\frac{\Delta T_c}{T_c^{(0)}} = -\frac{M^2}{3\pi\hbar^4 \zeta\left(\frac{3}{2}\right)^{2/3}} \frac{R}{n^{1/3}}. \quad (3.134)$$

Dies ist das Ergebnis, welches Lopatin und Vinokur bereits berechnet haben [20]. Man möchte nun einen dimensionslosen Ausdruck für die Verschiebung bekommen. Setzt man $R = g_{\text{imp}}^2 n_{\text{imp}}$ und $g_{\text{imp}} = \frac{2\pi\hbar^2}{M} a_{\text{imp}}$, wobei n_{imp} die Dichte der Streuzentren bezeichnet und a_{imp} deren Größe [16], folgt daraus ein vereinfachter Ausdruck für die Temperaturverschiebung. Dieser Ausdruck, der die Dichte der Streuzentren und deren Größe enthält, ist allerdings eine modellspezifische Interpretation. Man sieht jedoch, dass $n_{\text{imp}} a_{\text{imp}}^2$ die Dimension einer inversen Länge hat. Daher wird stattdessen eine typische Länge d definiert, und zwar mittels

$$R = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{M}\right)^2 \frac{1}{d}. \quad (3.135)$$

Setzt man dies in die Temperaturverschiebung (3.134) ein, so erhält man

$$\frac{\Delta T_c}{T_c^{(0)}} = \frac{4}{3\sqrt{2\pi}\zeta\left(\frac{3}{2}\right)^{1/3} \xi d n^{2/3}} \sum_{k=1}^{\infty} \left[\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{\sqrt{k}}{\left(8\pi(\xi n^{1/3})^2 \zeta\left(\frac{3}{2}\right)^{-2/3} + k\right)} \right] - \frac{4\pi}{3\zeta\left(\frac{3}{2}\right)^{2/3} d n^{1/3}}. \quad (3.136)$$

Bei Annahme einer konstanten Teilchendichte n ist dieses Ergebnis in Abbildung 3.1 für $1/dn^{1/3} = 0, 1$ aufgetragen. Die Grafik wurde mit Mathematica erstellt [36], wie auch alle anderen Grafiken in dieser Arbeit, wenn nicht explizit etwas anderes angegeben wurde. Für kleine Korrelationslänge gibt es zunächst eine deutliche negative Verschiebung. Diese wird für große Korrelationslänge immer kleiner, wechselt ihr Vorzeichen, und geht für große Korrelationslänge gegen eine positive Konstante. Dies kann man auch durch analytische Rechnung bestätigen, wie

im folgenden gezeigt wird.

Das Verhalten für kleine Korrelationslängen folgt einfach durch Entwicklung aus (3.136). Man erhält

$$\frac{\Delta T_c}{T_c^{(0)}} = \frac{32\sqrt{\pi}\xi}{3\sqrt{2}d} - \frac{4\pi}{3\zeta\left(\frac{3}{2}\right)^{2/3} dn^{1/3}} \quad (\xi \rightarrow 0). \quad (3.137)$$

Das Verhalten für große Korrelationslängen ist auf Grund der Tatsache, dass die einzelnen k -Summen in (3.136) nicht konvergieren, sondern nur beide zusammen, schwieriger herzuleiten. Dazu schreibt man die Summe um, und erhält so

$$\frac{\Delta T_c}{T_c^{(0)}} = \frac{32\sqrt{\pi}\xi}{3\sqrt{2}\zeta\left(\frac{3}{2}\right)d} \sum_{k=1}^{\infty} \left[\frac{1}{\sqrt{k} \left[8\pi(\xi n^{1/3})^2 \zeta\left(\frac{3}{2}\right)^{-2/3} + k \right]} \right] - \frac{4\pi}{3\zeta\left(\frac{3}{2}\right)^{2/3} dn^{1/3}}. \quad (3.138)$$

Mit Hilfe des Schwinger-Tricks (3.26) schreibt man dies um als

$$\frac{\Delta T_c}{T_c^{(0)}} = \frac{32\sqrt{\pi}\xi}{3\sqrt{2}\zeta\left(\frac{3}{2}\right)d} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{k}} \int_0^{\infty} d\tau \exp \left[-\tau \left(8\pi(\xi n^{1/3})^2 \zeta\left(\frac{3}{2}\right)^{-2/3} + k \right) \right] - \frac{4\pi}{3\zeta\left(\frac{3}{2}\right)^{2/3} dn^{1/3}}. \quad (3.139)$$

Als neue Integrationsvariable wählt man nun $z = 8\pi(\xi n^{1/3})^2 \zeta\left(\frac{3}{2}\right)^{-2/3} \tau$. Außerdem stellt man fest, dass Summation über k die polylogarithmische Funktion $\zeta_{1/2}$ ergibt. Man erhält so

$$\begin{aligned} \frac{\Delta T_c}{T_c^{(0)}} &= \frac{4}{3\sqrt{2\pi}\zeta\left(\frac{3}{2}\right)^{1/3} \xi dn^{2/3}} \int_0^{\infty} dz e^{-z} \zeta_{1/2} \left[\exp \left(-\frac{z}{8\pi(\xi n^{1/3})^2 \zeta\left(\frac{3}{2}\right)^{-2/3}} \right) \right] \\ &\quad - \frac{4\pi}{3\zeta\left(\frac{3}{2}\right)^{2/3} dn^{1/3}}. \end{aligned} \quad (3.140)$$

Für große Korrelationslängen kann man die polylogarithmischen Funktion mit Hilfe der Robinson-Formel (B.14) entwickeln. Man erhält so

$$\begin{aligned} \frac{\Delta T_c}{T_c^{(0)}} &= \frac{4}{3\sqrt{2\pi}\zeta\left(\frac{3}{2}\right)^{1/3} \xi dn^{2/3}} \int_0^{\infty} dz e^{-z} \left[\sqrt{\pi} \left(\frac{8\pi(\xi n^{1/3})^2 \zeta\left(\frac{3}{2}\right)^{-2/3}}{z} \right)^{1/2} + \zeta\left(\frac{1}{2}\right) \right] \\ &\quad - \frac{4\pi}{3\zeta\left(\frac{3}{2}\right)^{2/3} dn^{1/3}} + O\left(\frac{1}{\xi^2}\right). \end{aligned} \quad (3.141)$$

Das Ergebnis erhält man nun durch Ausführung der Integration. Es lautet

$$\frac{\Delta T_c}{T_c^{(0)}} = \frac{4}{3\sqrt{2\pi}\zeta\left(\frac{3}{2}\right)^{1/3} \xi dn^{2/3}} \zeta\left(\frac{1}{2}\right) + \frac{4\pi}{3\zeta\left(\frac{3}{2}\right)^{2/3} dn^{1/3}} \quad (\xi \rightarrow \infty). \quad (3.142)$$

Abbildung 3.1 zeigt, dass diese Herleitungen sich an die numerischen Werte anschmiegen. Die Verschiebung beginnt bei einer negativen Konstanten, steigt linear mit ξ , schneidet für $\xi n^{1/3} = 0,2$ den Nullpunkt, d.h. man hat hier keine Verschiebung, und geht mit $1/\xi$ gegen eine positive Konstante. Die beiden Konstanten für $\xi = 0$ und $\xi = \infty$ sind betragsmäßig gleich.

In Abbildung 3.2 ist das Ergebnis nochmals bei einer fest gewählten Korrelationslänge $\xi = 10 \mu\text{m}$ über die Teilchendichte aufgetragen. Dies entspricht typischen experimentell verwirklichten Korrelationslängen, siehe z.B. Inguscio *et al.* [22]. In dieser Abbildung wird im Gegensatz zu Abbildung 3.1 nur die Verschiebung der kritischen Temperatur betrachtet, die auf $1/d$ normiert ist. Anscheinend ist es bei den üblichen experimentell realisierten Korrelationslängen nur schwer möglich, die negative Verschiebung zu beobachten, es sei denn, man geht zu sehr stark verdünnten Gasen. Die üblichen Experimente haben Dichten von einigen 10^{14} cm^{-3} bzw. $10^2 \mu\text{m}^{-3}$, was der gewählten Skala entspricht [22].

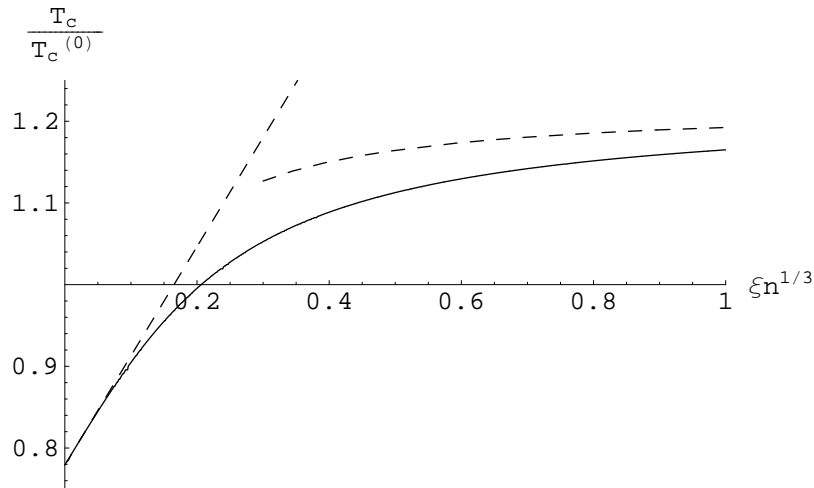


Abbildung 3.1: Normierte kritische Temperatur $T_c/T_c^{(0)}$ des freien Bose-Gases bei Annahme einer Gaußkorrelation für $1/dn^{1/3} = 0,1$ als Funktion der normierten Korrelationslänge $\xi n^{1/3}$. Die Teilchendichte ist hier festgehalten. Gestrichelt eingezeichnet ist der Verlauf für kleine Korrelationslänge, wo er linear in ξ ist, und für große Korrelationslänge, wo er proportional zu $1/\xi$ ist.

Die bei kleinen Korrelationslängen negative Verschiebung für die Unordnung hat ihre Analogie in der positiven Verschiebung für die repulsive Wechselwirkung, die Kleinert diskutiert [37]. In der Replika-Wirkung, mit den Bestandteilen (2.50) und (2.52), haben repulsive Wechselwirkung und Unordnung ein gegenteiliges Vorzeichen. Ansonsten sehen diese beiden Teile der Wirkung sehr ähnlich aus. Man kann also die Unordnung in diesem Bereich als effektive attraktive Wechselwirkung ansehen. Da die Verschiebung der kritischen Temperatur des freien Bose Gases für die repulsive Wechselwirkung positiv ist, überrascht es daher nicht, dass sie für die Unordnung negativ ist.

Schwieriger zu verstehen ist, dass die Verschiebung der kritischen Temperatur anscheinend das Vorzeichen wechselt. Die Reihe für die kritische Temperatur (3.136) ist im Prinzip eine Summation über beliebig große Wellenlängen. Die infraroten Terme sind für die kritischen Fluktuationen verantwortlich. Es gibt daher zwei konkurrierende, und sich widersprechende, Interpretationsmöglichkeiten.

Zum einen gibt es für jede Korrelationslänge immer eine Wellenlänge, die noch größer ist, und für die diese Korrelationslänge noch immer klein ist. Daher ist es möglich, dass die Unordnung das System qualitativ ändert, wie es auch bei Einführung einer Falle geschieht. Dass diese qualitative Änderung das Vorzeichen der Verschiebung ändert, und diesbezüglich vom Analogon einer attraktiven Wechselwirkung zum Analogon einer repulsiven Wechselwirkung wechselt, kann man jedoch nicht in der Wirkung beobachten. Auch das physikalische Bild, dass die Unordnung einer effektiven attraktiven Wechselwirkung entspricht, ließe erwarten, dass die unordnungsinduzierte Verschiebung stets ein anderes Vorzeichen besitzt als die Verschiebung, die durch die repulsive Wechselwirkung induziert wird. Daher spricht mehr gegen das Argument der Änderung des qualitativen Verhaltens des Systems, als dafür.

Insbesondere wäre für große Korrelationslängen zu erwarten, dass das Zufallspotential nahezu konstant ist, und daher keinen Einfluss mehr auf die kritische Temperatur hat. Im Falle der repulsiven Wechselwirkung ist das Ergebnis, dass es eine positive Verschiebung gibt, auf nichtstörungstheoretische Weise hergeleitet worden [37]. Hier sind insbesondere Divergenzen im Infraroten, d.h. für große Wellenlängen, wichtig. Es ist daher nicht auszuschließen, dass es auch für die attraktive Replika-Wechselwirkung weitere Terme gibt, die auf nichtstörungstheoretische Weise behandelt werden müssen. Möglicherweise korrigieren diese Terme das Ergebnis für große Korrelationslängen.

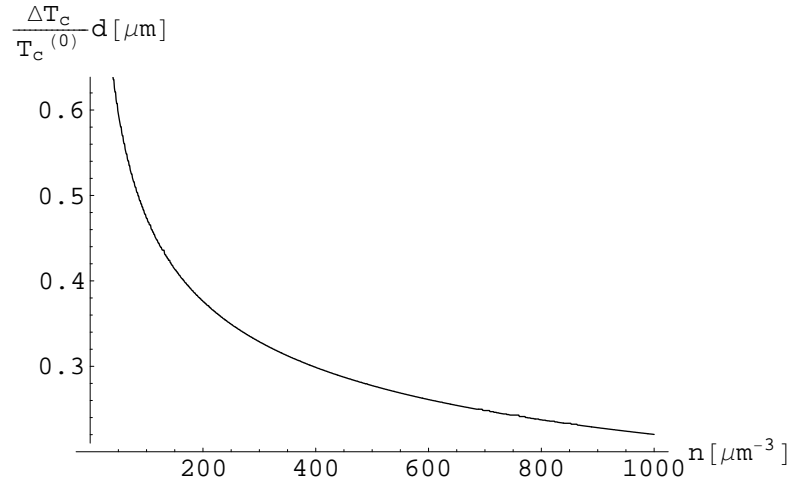


Abbildung 3.2: Gauß-Korrelation: Normierte Verschiebung der kritischen Temperatur $d\Delta T_c/T_c^{(0)}$ des freien Bose-Gases in μm für $\xi = 10 \mu\text{m}$ über die Dichte n in μm^{-3} aufgetragen. Die Korrelationslänge ist hier fest. Der Wertebereich der x -Achse und die Korrelationslänge wurden nach Inguscio *et al.* festgelegt [22].

Nach der hier gegebenen physikalischen Erwartung, dass die Verschiebung für große Korrelationslänge verschwinden sollte, ist ein solcher nichtstörungstheoretischer Term sogar zu erwarten.

In dieser Arbeit werden hierzu keine weiteren Untersuchungen angestellt, sodass dies eine Aufgabe für weitere Arbeiten auf diesem Gebiet bleibt.

Lorentz-Korrelation

Analog zum Fall der Gauß-Korrelation geht man bei Annahme einer Lorentz-Unordnungskorrelation vor, wobei man von dem speziellen großkanonischen Potential ausgeht, welches durch das ungestörte großkanonische Potential (3.37) und dessen Korrektur bei Annahme einer Lorentz-Korrelation (3.69) in $D = 3$ Dimensionen gegeben ist. Man erhält

$$\Omega = -\frac{V}{\beta\lambda^3}\zeta_{5/2}\left(e^{\beta\mu}\right) - \frac{RV}{(2\pi)^{3/2}\lambda^3} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{e^{\beta m\mu}}{m} \frac{\pi\sqrt{M}\beta}{2\hbar\xi^2} \exp\left[\frac{\hbar^2\beta m}{8M\xi^2}\right] \left\{1 - \Phi\left(\sqrt{\frac{\hbar^2\beta m}{8M\xi^2}}\right)\right\}. \quad (3.143)$$

Die Teilchendichte n erhält man wiederum aus der Ableitung nach dem chemischen Potential (3.124):

$$n = \frac{1}{\lambda^3}\zeta_{3/2}\left(e^{\beta\mu}\right) + \frac{R}{(2\pi)^{3/2}\lambda^3} \sum_{m=1}^{\infty} e^{\beta m\mu} \frac{\pi\sqrt{M}(\beta)^{3/2}}{2\hbar\xi^2} \exp\left[\frac{\hbar^2\beta m}{8M\xi^2}\right] \left\{1 - \Phi\left(\sqrt{\frac{\hbar^2\beta m}{8M\xi^2}}\right)\right\}. \quad (3.144)$$

Man ersetzt nun μ bis zur ersten Ordnung in R durch μ_r gemäß dem Ausdruck für das renormierte chemische Potential bei Annahme einer Lorentz-Korrelation (3.123), und bekommt so

$$n = \frac{1}{\lambda^3}\zeta_{3/2}\left(e^{\beta\mu_r}\right) - \frac{\beta}{\lambda^3}\zeta_{1/2}\left(e^{\beta\mu_r}\right) \frac{MR}{2\pi\hbar^2\xi} \frac{1}{1 + 2\xi\sqrt{-\frac{M}{2\hbar^2}\mu_r}} + \frac{R}{(2\pi)^{3/2}\lambda^3} \sum_{m=1}^{\infty} e^{\beta m\mu_r} \frac{\pi\sqrt{M}(\beta)^{3/2}}{2\hbar\xi^2} \exp\left[\frac{\hbar^2\beta m}{8M\xi^2}\right] \left\{1 - \Phi\left(\sqrt{\frac{\hbar^2\beta m}{8M\xi^2}}\right)\right\}. \quad (3.145)$$

Den Term mit $\zeta_{1/2}$ stellt man etwas um, und schreibt eine der dann entstehenden polylogarithmischen Funktionen wieder als Reihe. So erhält man

$$n = \frac{1}{\lambda^3} \zeta_{3/2} \left(e^{\beta \mu_r} \right) + \frac{\beta}{\lambda^3} \zeta_{1/2} \left(e^{\beta \mu_r} \right) \frac{MR}{2\pi \hbar^2 \xi} \frac{2\xi \sqrt{-\frac{M}{2\hbar^2} \mu_r}}{1 + 2\xi \sqrt{-\frac{M}{2\hbar^2} \mu_r}} - \frac{MR\beta}{2\pi \hbar^2 \xi \lambda^3} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{e^{m\beta \mu_r}}{m^{1/2}} + \frac{R}{(2\pi)^{3/2} \lambda^3} \sum_{m=1}^{\infty} e^{\beta m \mu_r} \frac{\pi \sqrt{M} (\beta)^{3/2}}{2\hbar \xi^2} \exp \left[\frac{\hbar^2 \beta m}{8M \xi^2} \right] \left\{ 1 - \Phi \left(\sqrt{\frac{\hbar^2 \beta m}{8M \xi^2}} \right) \right\}. \quad (3.146)$$

An der Phasengrenze geht $\mu_r \nearrow 0$. Man muss hierbei die Summen über m als zusammengehörig betrachten, da sich nur so die Divergenz für große m weghebt. Unter Beachtung der Robinson-Formel (B.14) bekommt man so die kritische Teilchendichte

$$n = \frac{1}{\lambda_c^3} \zeta \left(\frac{3}{2} \right) + \frac{2\pi R \beta_c^2}{\lambda_c^6} - \frac{R \sqrt{M} \beta_c}{\sqrt{2\pi} \hbar \xi \lambda_c^3} \sum_{m=1}^{\infty} \left\{ \frac{\sqrt{M}}{\sqrt{2\pi} \hbar \sqrt{m}} - \frac{\sqrt{\beta_c}}{4\xi} \exp \left[\frac{\hbar^2 \beta_c m}{8M \xi^2} \right] \left[1 - \Phi \left(\sqrt{\frac{\hbar^2 \beta_c m}{8M \xi^2}} \right) \right] \right\}. \quad (3.147)$$

Diese Teilchendichte ist nicht divergent, denn für große $y = \sqrt{\frac{\hbar^2 \beta_c m}{8M \xi^2}}$ gilt die asymptotische Entwicklung (3.71), sodass sich die scheinbare Divergenz für große m weghebt. Es ist allerdings zu beachten, dass die Reihe (3.71) nicht konvergiert. Das Restglied einer endlichen Reihe des Ausdrucks ist endlich, geht aber nicht gegen 0 [34, (8.254)]. Zur Berechnung der Verschiebung der kritischen Temperatur geht man nun analog zum vorherigen Abschnitt vor, und benutzt insbesondere den Ausdruck (3.135) für die Unordnungsstärke. Das Ergebnis für die Verschiebung der kritischen Temperatur lautet in diesen Einheiten

$$\frac{\Delta T_c}{T_c^{(0)}} = \frac{1}{6\xi d n^{2/3}} \sum_{m=1}^{\infty} \left\{ \frac{4}{\zeta \left(\frac{3}{2} \right)^{1/3}} \frac{1}{\sqrt{m}} - \frac{1}{n^{1/3} \xi} \exp \left[\frac{m}{16\pi \xi^2} \frac{\zeta(3/2)^{2/3}}{n^{2/3}} \right] \left[1 - \Phi \left(\sqrt{\frac{m}{16\pi \xi^2} \frac{\zeta(3/2)^{2/3}}{n^{2/3}}} \right) \right] \right\} - \frac{4\pi}{3\zeta \left(\frac{3}{2} \right)^{2/3} d n^{1/3}}. \quad (3.148)$$

Wegen der Entwicklung (3.71) ist auch hier der Grenzübergang $\xi \rightarrow 0$ möglich, und das Ergebnis ist dasselbe wie im Falle der Gauß-Korrelation (3.134). Auch hier kann also das Ergebnis von Lopatin und Vinokur reproduziert werden [20]. Auf Grund der asymptotischen Entwicklung (3.71) des komplizierten Summanden in (3.148) ist es möglich, die Verschiebung für kleine Korrelationslänge anzugeben. Sie lautet

$$\frac{\Delta T_c}{T_c^{(0)}} = \frac{16\pi \xi}{3d} - \frac{4\pi}{3\zeta \left(\frac{3}{2} \right)^{2/3} d n^{1/3}} \quad (\xi \rightarrow 0). \quad (3.149)$$

Wie im Falle der Gauß-Korrelation (3.137) ändert sich die Verschiebung für kleine Korrelationslänge linear. Für große Korrelationslänge ist die Angabe eines analytischen Ausdrucks nur schwer herzuleiten. Der Grenzwert für $\xi = \infty$ kann allerdings ohne Verwendung von Regularisierungsmethoden bestimmt werden. Dazu ersetzt man die Summe in der Temperaturverschiebung (3.148) durch ein Integral. Hierzu erweitert man zunächst den ersten Summanden, und erhält so

$$\frac{\Delta T_c}{T_c^{(0)}} = \frac{1}{6\xi d n^{2/3}} \sum_{m=1}^{\infty} \left\{ \frac{4}{\zeta \left(\frac{3}{2} \right)^{1/3}} \sqrt{\frac{16\pi \xi^2 n^{2/3}}{\zeta(3/2)^{2/3} m}} \frac{\zeta(3/2)^{1/3}}{4\sqrt{\pi} \xi n^{1/3}} - \frac{1}{n^{1/3} \xi} \exp \left[\frac{m}{16\pi \xi^2} \frac{\zeta(3/2)^{2/3}}{n^{2/3}} \right] \left[1 - \Phi \left(\sqrt{\frac{m}{16\pi \xi^2} \frac{\zeta(3/2)^{2/3}}{n^{2/3}}} \right) \right] \right\} - \frac{4\pi}{3\zeta \left(\frac{3}{2} \right)^{2/3} d n^{1/3}}. \quad (3.150)$$

Für große Korrelationslänge kann man die Summe durch ein Integral über $x = \frac{\zeta(3/2)^{2/3} m}{16\pi\xi^2 n^{2/3}}$ ersetzen. So erhält man

$$\frac{\Delta T_c}{T_c^{(0)}} = \frac{8\pi}{3\zeta\left(\frac{3}{2}\right)^{2/3} dn^{1/3}} \int_0^\infty dx \left\{ \frac{1}{\sqrt{\pi x}} - e^x [1 - \Phi(\sqrt{x})] \right\} - \frac{4\pi}{3\zeta\left(\frac{3}{2}\right)^{2/3} dn^{1/3}}. \quad (3.151)$$

Das Integral ist konvergent, und das Ergebnis lautet

$$\frac{\Delta T_c}{T_c^{(0)}} = \frac{4\pi}{3\zeta\left(\frac{3}{2}\right)^{2/3} dn^{1/3}} \quad (\xi = \infty). \quad (3.152)$$

Der Grenzwert der Verschiebung für große Korrelationslänge ist bei der Lorentz-Korrelation also derselbe wie bei der Gauß-Korrelation, siehe (3.142). Die Verschiebung macht auch hier einen Vorzeichenwechsel. Die Verschiebung für $\xi = 0$ und für $\xi = \infty$ sind auch hier betragsmäßig gleich groß.

Wie im Falle der Gauß-Korrelation ist das Ergebnis für die Verschiebung auch hier nicht bedenkenlos hinnehmbar, denn nicht störungstheoretische Effekte können auftauchen.

Der erste von der Korrelationslänge ξ abhängige Beitrag für große Unordnung soll nun ebenfalls bestimmt werden. Da der Ausdruck für die Temperaturverschiebung analytisch korrekt nur sehr schwer zu behandeln ist, werden hierbei Regularisierungsmethoden verwendet. Dies ist hier möglich, da bekannt ist, dass die Temperaturverschiebung für jede Korrelationslänge sinnvoll definiert ist, da die Reihe in (3.148) für jedes ξ konvergiert. Deshalb muss man die Temperaturverschiebung durch eine analytische Funktion ausdrücken können. Durch analytische Fortsetzung für sich genommen divergenter Terme in den nicht divergenten Bereich wird genau dies erreicht.

Zunächst schreibt man die Funktion

$$f(z) = e^{z^2} [1 - \Phi(z)] \quad (3.153)$$

mit Hilfe der Definition des Wahrscheinlichkeitsintegrals (3.70) als

$$f(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_z^\infty dt e^{t^2 - z^2}. \quad (3.154)$$

Die Substitution $u = t^2/z^2 - 1$ führt dann auf den Ausdruck

$$f(z) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty du \frac{z}{\sqrt{u+1}} e^{-uz^2}. \quad (3.155)$$

Offenbar taucht in der Temperaturverschiebung (3.148) eine solche Funktion $f(z)$ mit $z = \sqrt{\frac{m}{16\pi\xi^2} \frac{\zeta(3/2)^{2/3}}{n^{2/3}}}$ auf. Man schreibt die Verschiebung daher als

$$\begin{aligned} \frac{\Delta T_c}{T_c^{(0)}} &= \frac{2}{3\xi dn^{2/3} \zeta\left(\frac{3}{2}\right)^{1/3}} \sum_{m=1}^\infty \frac{1}{\sqrt{m}} - \frac{4\pi}{3\zeta\left(\frac{3}{2}\right)^{2/3} dn^{1/3}} \\ &\quad - \frac{1}{6\xi^2 dn} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty du \frac{1}{\sqrt{u+1}} \frac{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)^{1/3}}{4\sqrt{\pi}\xi n^{1/3}} \sum_{m=1}^\infty \sqrt{m} \exp\left[-\frac{m\zeta\left(\frac{3}{2}\right)^{2/3}}{16\pi\xi^2 n^{2/3}} u\right]. \end{aligned} \quad (3.156)$$

Die erste Summe über m ist für sich genommen divergent. Der divergente Term wird von der zweiten Summe kompensiert, wie bereits gesehen. Diese zweite Summe wird allerdings auf eine mathematisch unzulässige Weise entwickelt, und Divergenzen, die nach dieser Entwicklung auftauchen, werden regularisiert. Deshalb muss man auch die erste Summe regularisieren. Führt man die Regularisierung durch, so ist die erste Summe als $\zeta\left(\frac{1}{2}\right)$ zu verstehen. Die Summe unter dem Integral ergibt die polylogarithmische Funktion $\zeta_{-1/2}$. Daher ist

$$\begin{aligned} \frac{\Delta T_c}{T_c^{(0)}} &= \frac{2}{3\xi dn^{2/3} \zeta\left(\frac{3}{2}\right)^{1/3}} \zeta\left(\frac{1}{2}\right) - \frac{4\pi}{3\zeta\left(\frac{3}{2}\right)^{2/3} dn^{1/3}} \\ &\quad - \frac{1}{6\xi^2 dn} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty du \frac{1}{\sqrt{u+1}} \frac{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)^{1/3}}{4\sqrt{\pi}\xi n^{1/3}} \zeta_{-1/2} \left\{ \exp\left[-\frac{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)^{2/3}}{16\pi\xi^2 n^{2/3}} u\right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.157)$$

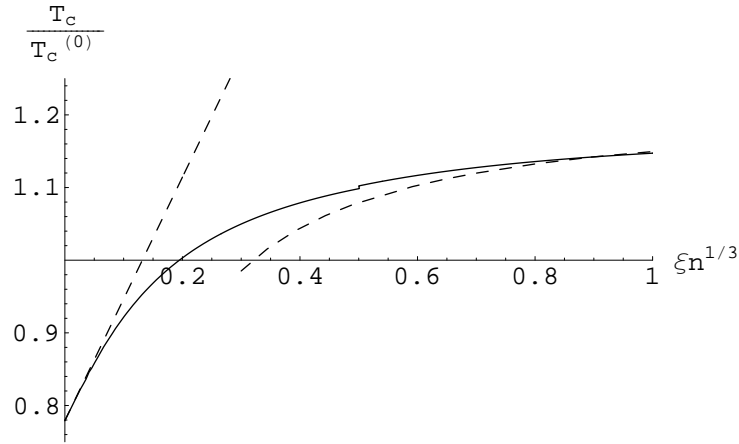


Abbildung 3.3: Normierte kritische Temperatur $T_c/T_c^{(0)}$ des freien Bose-Gases bei Annahme einer Lorentz-Korrelation für $1/dn^{1/3} = 0,1$ gegen die normierte Korrelationslänge $\xi n^{1/3}$ aufgetragen. Die Teilchendichte ist hier festgehalten. Gestrichelt eingezeichnet ist der Verlauf für kleine Korrelationslänge, wo er linear in ξ ist, und für große Korrelationslänge, wo er proportional zu $1/\xi$ ist.

Für große Korrelationslängen benutzt man nun die Robinson-Formel (B.14), um die polylogarithmische Funktion nach inversen Potenzen von ξ zu entwickeln. Vernachlässigt man alle Terme, die von höherer Ordnung als $1/\xi$ sind, also Terme proportional zu $1/\xi^2$ und kleiner, so folgt

$$\frac{\Delta T_c}{T_c^{(0)}} \approx \frac{2}{3\xi dn^{2/3} \zeta\left(\frac{3}{2}\right)^{1/3}} \zeta\left(\frac{1}{2}\right) - \frac{4\pi}{3\zeta\left(\frac{3}{2}\right)^{2/3} dn^{1/3}} - \frac{4\pi}{3\zeta\left(\frac{3}{2}\right)^{2/3} dn^{1/3}} \int_0^\infty du \frac{u^{3/2}}{\sqrt{u+1}}. \quad (3.158)$$

Dies stellt eigentlich eine mathematisch nicht zulässige Entwicklung der polylogarithmischen Funktion dar. Man geht davon aus, dass das Argument der Exponentialfunktion stets klein ist. Dies ist für große u aber offensichtlich nicht der Fall. Bei der Entwicklung ist zu berücksichtigen, dass die Terme, die $O(1/\xi^2)$ und von höherer Ordnung in der inversen Korrelationslänge sind, im Prinzip divergent sind, und regularisiert werden müssen. Mittels dimensionaler Regularisierung (D.5) kann man das entstandene divergente Integral behandeln. Man setzt die Funktion also analytisch fort. Dies ist hier sinnvoll, da man weiß, dass das Ergebnis für die Temperaturverschiebung endlich ist. Insgesamt erhält man

$$\frac{\Delta T_c}{T_c^{(0)}} = \frac{2\zeta\left(\frac{1}{2}\right)}{3\zeta\left(\frac{3}{2}\right)^{1/3} \xi dn^{2/3}} + \frac{4\pi}{3\zeta\left(\frac{3}{2}\right)^{2/3} dn^{1/3}} \quad (\xi \rightarrow \infty). \quad (3.159)$$

Eine numerische Auswertung der Temperaturverschiebung ist deutlich aufwändiger als im Falle der Gauß-Korrelation, da die Reihe nur sehr langsam konvergiert. Die Auswertung geschieht mit Maple [38]. Das Ergebnis für die kritische Temperatur für $1/dn^{1/3} = 0,1$ ist in Abbildung 3.3 aufgetragen. Gleichzeitig sind auch die Asymptoten für große und kleine Korrelationslängen, (3.149) und (3.159), gestrichelt eingetragen.

Die analytisch hergeleiteten Resultate bestätigen sich in der Numerik. Die Verschiebung macht einen Vorzeichenwechsel bei $\xi n^{1/3} = 0,2$.

Dieser Vorzeichenwechsel ist, genau wie im Falle der Gauß-Korrelation, vermutlich nicht physikalisch, da nicht störungstheoretische Effekte nicht berücksichtigt worden sind.

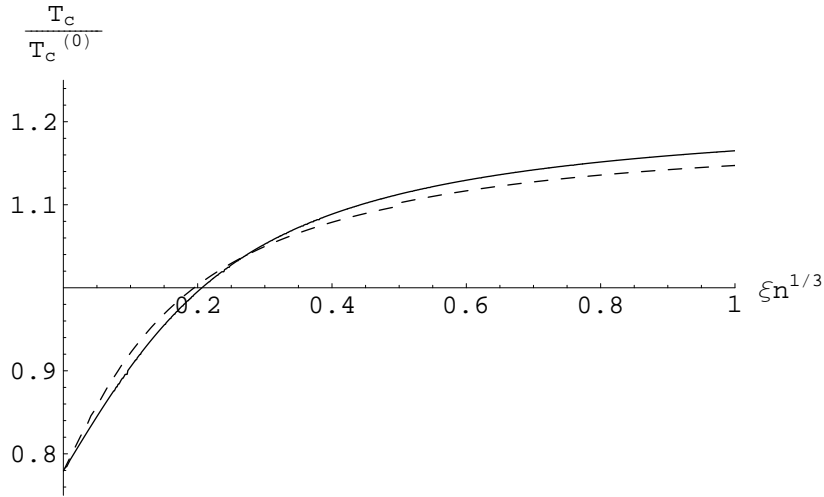


Abbildung 3.4: Normierte kritische Temperatur $T_c/T_c^{(0)}$ des freien Bose-Gases für $1/dn^{1/3} = 0,1$ gegen die normierte Korrelationslänge $\xi n^{1/3}$ aufgetragen. Die durchgezogene Linie entspricht dabei der Gauß-Korrelation und die gestrichelte Linie entspricht der Lorentz-Korrelation.

Vergleich der Korrelationen

In Abbildung 3.4 sind die Verschiebungen der kritischen Temperatur des freien Bose-Gases für die Gauß-Korrelation und für die Lorentz-Korrelation gleichzeitig aufgetragen. Die Gauß-Korrelation wird hierbei durch die durchgezogene Linie dargestellt, und die Lorentz-Korrelation durch die gestrichelte Linie. Offenbar liegen beide Kurven sehr nahe beieinander. Der Vorzeichenwechsel der Verschiebung bei den beiden unterschiedlichen Korrelationen geschieht nicht an derselben Stelle, aber die Stellen liegen sehr nahe beieinander.

3.7.2 Anisotrope harmonische Falle

Gauß-Korrelation

Für die harmonische Falle ergibt sich nach dem ungestörten großkanonische Potential für die Falle (3.38) und dessen Korrektur in R bei Annahme einer Gauß-Korrelation (3.62) das großkanonische Potential des Systems in $D = 3$ Dimensionen zu

$$\Omega = -\frac{1}{\beta} \frac{1}{(\hbar\beta\tilde{\omega})^3} \zeta_4(e^{\beta\mu}) - \frac{R\beta}{2(2\pi)^{3/2}\xi} \frac{1}{(\hbar\beta\tilde{\omega})^3} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{e^{k\beta\mu}}{k^2 \left(\xi^2 + \frac{\hbar^2\beta k}{4M}\right)}, \quad (3.160)$$

wobei hier erneut $\tilde{\omega} = (\omega_1\omega_2\omega_3)^{1/3}$ das geometrische Mittel der Fallenfrequenzen darstellt. Auch hier wird die Teilchendichte durch Ableitung nach μ bestimmt (3.124), woraus sich durch Multiplikation mit dem Volumen die Teilchenzahl $N = nV$ ergibt

$$N = \frac{1}{(\hbar\beta\tilde{\omega})^3} \zeta_3(e^{\beta\mu}) + \frac{R\beta^2}{2(2\pi)^{3/2}\xi} \frac{1}{(\hbar\beta\tilde{\omega})^3} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{e^{k\beta\mu}}{k \left(\xi^2 + \frac{\hbar^2\beta k}{4M}\right)}. \quad (3.161)$$

Man drückt wie schon im Fall des freien Bose-Gases μ durch μ_r bis zur ersten Ordnung in R aus (3.114). Dabei beachte man, dass für die harmonische Falle $U(\mathbf{x}_{\min}) = 0$ gilt.

$$N = \frac{1}{(\hbar\beta\tilde{\omega})^3} \zeta_3(e^{\beta\mu_r}) + \frac{R\beta^2}{2(2\pi)^{3/2}\xi} \frac{1}{(\hbar\beta\tilde{\omega})^3} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{e^{k\beta\mu_r}}{k \left(\xi^2 + \frac{\hbar^2\beta k}{4M} \right)} + \frac{1}{(\hbar\beta\tilde{\omega})^3} \zeta_2(e^{\beta\mu_r}) \beta \left\{ -\frac{2M}{(2\pi)^{3/2}\hbar^2\xi} R + \frac{M}{\pi\hbar^2} R \sqrt{\frac{M}{2\hbar^2}} (-\mu_r) e^{\frac{M}{\hbar^2}(-\mu_r)\xi^2} \left[1 - \Phi \left(\sqrt{\frac{M}{\hbar^2}} (-\mu_r)\xi \right) \right] \right\}. \quad (3.162)$$

Wiederum geht an der Phasengrenze $\mu \nearrow \mu_c$ bzw. $\mu_r \nearrow 0$, und für die Teilchendichte folgt nach Umschreiben von ζ_2 in die definierende Reihe (3.34)

$$N = \frac{1}{(\hbar\beta_c\tilde{\omega})^3} \zeta(3) + \frac{2M\beta_c}{(2\pi)^{3/2}\hbar^2\xi} \frac{R}{(\hbar\beta_c\tilde{\omega})^3} \sum_{k=1}^{\infty} \left[\frac{1}{k^2} - \frac{1}{k \left(\frac{4M}{\hbar^2\beta_c}\xi^2 + k \right)} \right]. \quad (3.163)$$

Für $\xi \rightarrow 0$ ist dieser Ausdruck wiederum wohldefiniert. Für $R = 0$ folgt wie beim freien Gas die kritische Temperatur $T_c^{(0)}$ in der Falle ohne Unordnung

$$k_B T_c^{(0)} = \left(\frac{N}{\zeta(3)} \right)^{1/3} \hbar\tilde{\omega}. \quad (3.164)$$

In der Gleichung für die kritische Teilchenzahl (3.163) setzt man nun $T_c = T_c^{(0)} + \Delta T_c$ und entwickelt bis zur ersten Ordnung in R . Man erhält

$$N = \frac{1}{(\hbar\beta_c^{(0)}\tilde{\omega})^3} \zeta(3) \left(1 + 3 \frac{\Delta T_c}{T_c^{(0)}} \right) + \frac{2M\beta_c^{(0)}}{(2\pi)^{3/2}\hbar^2\xi} \frac{R}{(\hbar\beta_c^{(0)}\tilde{\omega})^3} \sum_{k=1}^{\infty} \left[\frac{1}{k^2} - \frac{1}{k \left(\frac{4M}{\hbar^2\beta_c^{(0)}}\xi^2 + k \right)} \right]. \quad (3.165)$$

Einsetzen der ungestörten kritischen Temperatur (3.164) liefert dann die Verschiebung der kritischen Temperatur. Das Ergebnis lautet

$$\frac{\Delta T_c}{T_c^{(0)}} = \frac{2M}{3(2\pi)^{3/2}\hbar^3\tilde{\omega}\xi} \frac{1}{[\zeta(3)]^{2/3} N^{1/3}} R \sum_{k=1}^{\infty} \left\{ \frac{1}{k^2} - \frac{1}{k \left[\frac{4M\tilde{\omega}}{\hbar} \left(\frac{N}{\zeta(3)} \right)^{1/3} \xi^2 + k \right]} \right\}. \quad (3.166)$$

Bei verschwindender Korrelationslänge gibt es also keine Verschiebung der kritischen Temperatur, wie eine Entwicklung nach ξ zeigt. Nach Einführung dimensionsloser Größen,

$$\begin{aligned} \tilde{\xi} &= \sqrt{\frac{M\tilde{\omega}}{\hbar}} N^{1/6} \xi, \\ \tilde{R} &= \frac{M^{3/2}}{\sqrt{\hbar\tilde{\omega}\hbar^3} N^{1/6}} R, \end{aligned} \quad (3.167)$$

kann man die Verschiebung der kritischen Temperatur numerisch auswerten. Dies ist in Abbildung 3.5 geschehen. Für sehr eine Korrelationslänge $\tilde{\xi} = 0$ gibt es keine Verschiebung der kritischen Temperatur. Bei kleiner Korrelationslänge wächst die Verschiebung zunächst linear an, und erreicht einem Maximalwert der Verschiebung, der bei $\tilde{\xi} \approx 0,5$ erreicht wird. Danach wird die Verschiebung wieder kleiner, um für $\tilde{\xi} \rightarrow \infty$ wieder gegen die kritische Temperatur ohne Unordnung zu streben. Dies geschieht proportional zur inversen Korrelationslänge $1/\tilde{\xi}$. Offenbar gibt es hier kein monotonen Verhalten und auch keinen Vorzeichenwechsel der Verschiebung. Mathematisch

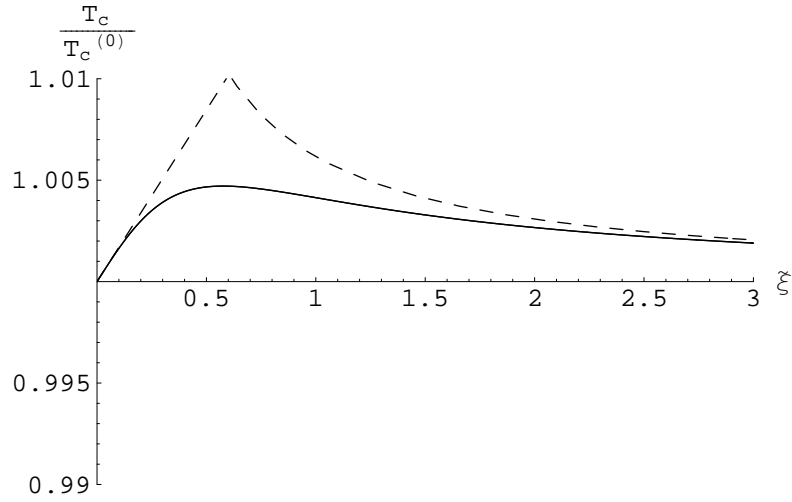


Abbildung 3.5: Gauß-Korrelation: Normierte kritische Temperatur $T_c/T_c^{(0)}$ des Bose-Gases in einer harmonischen Falle für $\tilde{R} = 0, 1$ gegen die normierte Korrelationslänge $\tilde{\xi}$ aufgetragen. Gestrichelt eingezeichnet sind das Verhalten für kleine und große $\tilde{\xi}$. Es ist linear für kleine $\tilde{\xi}$ und proportional zu $1/\tilde{\xi}$ für große $\tilde{\xi}$. Anders als beim freien Bose-Gas kommt es hier nicht zu einem monotonen Verhalten der Verschiebung, da die Falle das Verhalten des Systems auf großen Längenskalen ändert. Das Maximum entsteht an der Stelle, an der die dominante Längenskala für kleine Korrelationslänge (Oszillatorlänge) in die für große Korrelationslänge (mittlerer Teilchenabstand) übergeht.

gesprochen liegt der Grund darin, dass es keine Divergenz der polylogarithmischen Funktion in der Gleichung für die kritische Teilchenzahl (3.163) für $\mu_r \rightarrow 0$ gibt. Ein physikalisches Verständnis wird dann erreicht, wenn man sich daran erinnert, dass eine harmonische Falle das langwellige Verhalten ändert, da sie für große Distanzen quadratisch anwächst. Aus diesen mathematischen Gründen ist zu erwarten, dass auch die Verwendung einer nicht harmonischen Falle nicht zu einem monotonen Verhalten führt. Ebenfalls ist kein Vorzeichenwechsel zu erwarten. Für die anisotrope harmonische Falle erhält man bei kleinen Korrelationslängen das asymptotische Verhalten

$$\frac{T_c}{T_c^{(0)}} = 1 + \frac{8}{3(2\pi)^{3/2}} \tilde{R} \tilde{\xi} \quad (\tilde{\xi} \rightarrow 0), \quad (3.168)$$

während man bei großen Korrelationslängen das Verhalten

$$\frac{T_c}{T_c^{(0)}} = 1 + \frac{2\zeta(2)}{3(2\pi)^{3/2}[\zeta(3)]^{2/3}} \frac{\tilde{R}}{\tilde{\xi}} \quad (\tilde{\xi} \rightarrow \infty) \quad (3.169)$$

erhält. Setzt man die dimensionslosen Einheiten (3.167) wieder hier ein, so stellt man fest, dass für kleine Korrelationslängen die Oszillatorlänge $\sqrt{\frac{\hbar}{M\tilde{\omega}}}$ die dominierende Längenskala darstellt, während für große Korrelationslänge der mittlere Teilchenabstand $\sqrt{\frac{\hbar}{M\tilde{\omega}}} N^{-1/3}$ wichtiger ist. Die beiden Längenskalen treffen sich für $\tilde{\xi} \approx 1$, wobei dann $\sqrt{\frac{\hbar}{M\tilde{\omega}}} N^{-1/6}$ das geometrische Mittel der beiden Längenskalen darstellt. In Abbildung 3.5 ist an dieser Stelle das Maximum der Verschiebung zu beobachten.

Möchte man die Abhängigkeit von der Teilchenzahl untersuchen, so definiert man die dimensionslosen Größen

$$\begin{aligned} \bar{\xi} &= \sqrt{\frac{M\tilde{\omega}}{\hbar}} \xi, \\ \bar{R} &= \frac{M^{3/2}}{\sqrt{\hbar\tilde{\omega}\hbar^3}} R. \end{aligned} \quad (3.170)$$

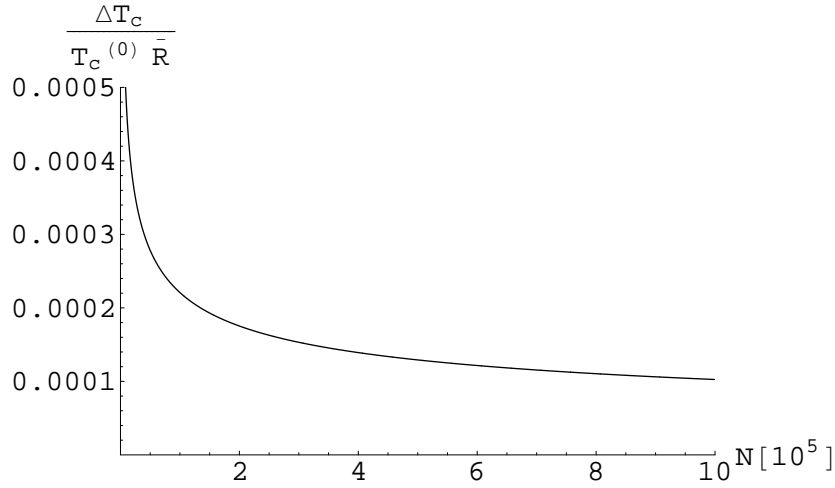


Abbildung 3.6: Gauß-Korrelation: Normierte Verschiebung der kritischen Temperatur $\Delta T_c / (T_c^{(0)} / \bar{R})$ des Bose-Gases in einer anisotropen harmonischen Falle gegen die Teilchenzahl N in Einheiten von 10^4 Teilchen aufgetragen. Angenommen ist die Verwendung von Rubidium-85 in einer Falle mit mittlerer Frequenz $\tilde{\omega} \approx 250$ Hz, und die Überlagerung eines Zufallspotentials mit einer Korrelationslänge von $\xi = 10 \mu\text{m}$.

An dieser Stelle müssen erneut Werte gewählt werden, wobei erneut Inguscio *et al.* [22,8] herangezogen wird. Demnach ist $\xi = 10 \mu\text{m}$, man hat Rubidium-85 ($M = 85 \times 1,66 \times 10^{-27}$ kg) in der Falle, welche die drei Frequenzen $\omega_z = 2\pi \times 8,74$ Hz und zwei Mal $\omega_{\perp} = 2\pi \times 85$ Hz aufweist. Das ergibt $\bar{\xi} \approx 6$. Die Teilchenzahl beträgt etwa $N \approx 3 \times 10^5$, womit der Bereich der x -Achse festgelegt wird, der betrachtet wird. Das Ergebnis ist in Abbildung 3.6 festgehalten. Die Verschiebung der kritischen Temperatur beträgt bei der hier gewählten Normierung bei üblichen Teilchenzahlen von einigen 10^5 Teilchen nur einige Zehntel eines Promille.

Es ist nun interessant zu wissen, wie groß der numerische Faktor \bar{R} ist, auf den die Verschiebung normiert ist. Alle experimentellen Arbeiten, die betrachtet wurden, machen leider keine Aussagen zur Korrelationsfunktion. Daher wird folgende Überlegung angestellt: Die Einheit von R ist $\text{Energie}^2 \times \text{Länge}^3$. Die Korrelationsfunktion eines Speckle-Potentials ist proportional zum Quadrat der Intensität [39, (Kapitel 2)]. Inguscio *et al* geben die Stärke des Zufallspotentials in Einheiten der Frequenz $\bar{\omega}$ an, und nennen eine typische Längenskala l für das Zufallspotential [8]. Damit folgt für R :

$$R \approx \hbar^2 \bar{\omega}^2 l^3. \quad (3.171)$$

Hieraus und mit der Definition von \bar{R} aus (3.170) kann man eine Abschätzung für \bar{R} schlussfolgern:

$$\bar{R} \approx \frac{\bar{\omega}^2 l^3}{\tilde{\omega}^2 a_{\text{ho}}^3}. \quad (3.172)$$

Hierbei ist $a_{\text{ho}} = \sqrt{\frac{\hbar}{M\tilde{\omega}}}$ die Oszillatorlänge. Nimmt man ein schwaches Zufallspotential an, welches das Kondensat noch nicht stark stört, was in der Inguscio-Arbeit etwa $\bar{\omega} \approx 2\pi \times 50$ Hz entspricht, und nimmt man zusätzlich die typische Längenskala von etwa $l = 10 \mu\text{m}$, so folgt daraus

$$\bar{R} \approx 0.2 \times 10^2. \quad (3.173)$$

Dies führt zu Verschiebungen von einigen Prozent, bis hin zum Faktor 0,05 bei einer Teilchenzahl von 10^5 . Dies sollte experimentell beobachtbar sein. Es ist aber zu beachten, dass bei kleinerer Korrelationslänge eine deutlich stärkere Verschiebung auftritt, sodass es sinnvoll ist, bei so kleiner Unordnung wie möglich zu arbeiten.

Auch hier kann man Analogien zum Fall der repulsiven Wechselwirkung ziehen. Betrachtet man die Unordnung als eine Art attraktive Wechselwirkung, so ist zu erwarten, dass die Verschiebung der kritischen Temperatur durch diese ein umgekehrtes Vorzeichen wie die Verschiebung durch eine repulsive Wechselwirkung hat. Diese ist für das Bose-Gas in einer harmonischen Falle z.B. in dem Buch von Pitaevskii und Stringari diskutiert, und ist erwartungsgemäß negativ [3, (Kapitel 13)]. Das Ergebnis für die kritische Temperatur ist also für die harmonische Falle zu verstehen, wenn man sich die Verschiebung bei der repulsiven Wechselwirkung ansieht. Eine physikalische Begründung der Richtung der Temperaturverschiebung ist ebenfalls möglich: In einer Falle sorgt eine repulsive Wechselwirkung dafür, dass das System in der Faltenmitte eine geringere Dichte aufweisen. Eine attraktive Wechselwirkung sorgt für eine höhere Dichte. Im Falle des freien, idealen Bose-Gases ist die kritische Temperatur proportional zur Dichte $n^{2/3}$. Da die Dichte bei attraktiver Wechselwirkung erhöht wird, ist zu erwarten, dass es früher zur Kondensation kommt. Man bekommt also eine positive Temperaturverschiebung. Offensichtlich ist dies für die Unordnung der Fall, die man als attraktive Wechselwirkung verstehen kann.

Im Fall des freien Bose-Gases gibt es nach der Diskussion auf Seite 43 wahrscheinlich nicht störungstheoretische Terme, die das Ergebnis für die Verschiebung korrigieren. Dies ist für die Falle nicht zu erwarten, da die Ergebnisse für die Falle zum einen dem physikalischen Verständnis entsprechen, und zum anderen im Fall des repulsiv wechselwirkenden Bose-Gases in einer Falle in erster Ordnung der Wechselwirkungsstärke nur störungstheoretische Beiträge zur Temperaturverschiebung auftauchen [35].

Lorentz-Korrelation

Das großkanonische Potential für das Bose-Gas in einer anisotropen harmonischen Falle ergibt sich nach dem Ergebnis für das ungestörte großkanonische Potential (3.38) und dessen Korrektur in R bei Annahme einer Lorentz-Korrelation (3.73) zu

$$\Omega = -\frac{1}{\beta} \frac{1}{(\hbar\beta\tilde{\omega})^3} \zeta_4(e^{\beta\mu}) - \frac{R}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{e^{\beta k\mu}}{k^{5/2}} \frac{\pi\sqrt{M}\beta}{2\hbar\xi^2} \frac{1}{(\hbar\beta\tilde{\omega})^3} \exp\left[\frac{\hbar^2\beta k}{8M\xi^2}\right] \left\{ 1 - \Phi\left(\sqrt{\frac{\hbar^2\beta k}{8M\xi^2}}\right) \right\}. \quad (3.174)$$

Wiederum erhält man die Teilchendichte durch partielle Ableitung nach dem chemischen Potential. Es wird hier direkt mit der Teilchenzahl $N = nV$ gearbeitet.

$$N = \frac{1}{(\hbar\beta\tilde{\omega})^3} \zeta_3(e^{\beta\mu}) + \frac{R}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{e^{\beta k\mu}}{k^{3/2}} \frac{\pi\sqrt{M}\beta^{3/2}}{2\hbar\xi^2} \frac{1}{(\hbar\beta\tilde{\omega})^3} \exp\left[\frac{\hbar^2\beta k}{8M\xi^2}\right] \left\{ 1 - \Phi\left(\sqrt{\frac{\hbar^2\beta k}{8M\xi^2}}\right) \right\}. \quad (3.175)$$

Man ersetzt wiederum mittels (3.123) das chemische Potential durch das renormierte chemische Potential. Erneut gilt $U(\mathbf{x}_{\min}) = 0$.

$$N = \frac{1}{(\hbar\beta\tilde{\omega})^3} \zeta_3(e^{\beta\mu_r}) - \frac{\beta}{(\hbar\beta\tilde{\omega})^3} \zeta_2(e^{\beta\mu_r}) \frac{M}{2\pi\hbar^2} \frac{R}{\xi} \frac{1}{1 + 2\xi\sqrt{-\frac{M}{2\hbar^2}\mu_r}} + \frac{R}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{e^{\beta k\mu_r}}{k^{3/2}} \frac{\pi\sqrt{M}\beta^{3/2}}{2\hbar\xi^2} \frac{1}{(\hbar\beta\tilde{\omega})^3} \exp\left[\frac{\hbar^2\beta k}{8M\xi^2}\right] \left\{ 1 - \Phi\left(\sqrt{\frac{\hbar^2\beta k}{8M\xi^2}}\right) \right\}. \quad (3.176)$$

Nun betrachtet man die Stelle des Phasenübergangs mittels $\mu_r \nearrow 0$. Da keine Divergenzen auftreten, erhält man nach Umschreiben von $\zeta(2)$ in die definierende Reihe sofort

$$N = \frac{1}{(\hbar\beta_c\tilde{\omega})^3} \zeta(3) - \frac{R\sqrt{M}}{\sqrt{2\pi}\hbar\xi} \frac{\beta_c}{(\hbar\beta_c\tilde{\omega})^3} \sum_{k=1}^{\infty} \left\{ \frac{\sqrt{M}}{\sqrt{2\pi}\hbar} \frac{1}{k^2} - \frac{\sqrt{\beta_c}}{4\xi} \frac{1}{k^{3/2}} \exp\left[\frac{\hbar^2\beta_c k}{8M\xi^2}\right] \left[1 - \Phi\left(\sqrt{\frac{\hbar^2\beta_c k}{8M\xi^2}}\right) \right] \right\}. \quad (3.177)$$

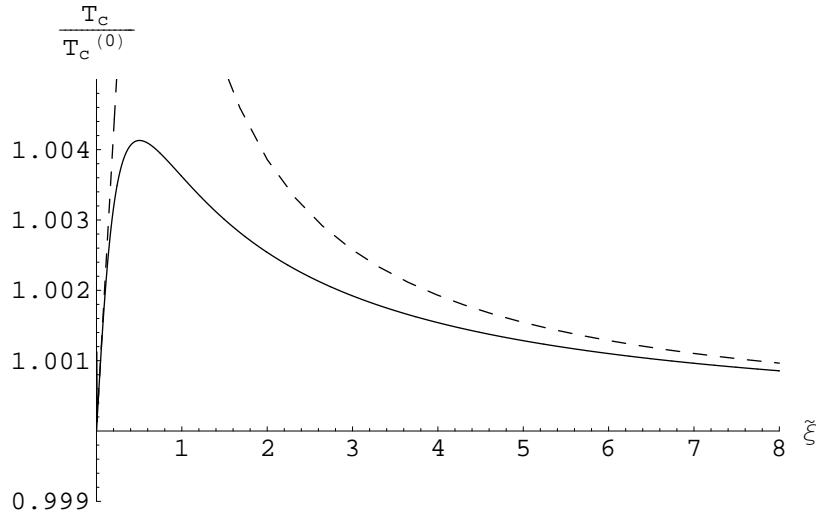


Abbildung 3.7: Lorentz-Korrelation: Normierte kritische Temperatur $T_c/T_c^{(0)}$ des Bose-Gases in einer harmonischen Falle für $\tilde{R} = 0,1$ gegen die normierte Korrelationslänge $\tilde{\xi}$ aufgetragen. Gestrichelt eingezeichnet sind das Verhalten für kleine und große $\tilde{\xi}$. Es ist linear für kleine $\tilde{\xi}$ und proportional zu $1/\tilde{\xi}$ für große $\tilde{\xi}$. Die Interpretation ist die gleiche, die bei der Gauß-Korrelation gegeben wird, siehe Abbildung 3.5.

Analog wie im vorherigen Abschnitt entwickelt man nun nach der Verschiebung der kritischen Temperatur, bestimmt die ungestörte kritische Temperatur des Systems (3.164), und setzt diese dann in die Teilchenzahlgleichung ein. So berechnet sich die Verschiebung der kritischen Temperatur zu

$$\frac{\Delta T_c}{T_c^{(0)}} = \frac{R\sqrt{M}}{3\sqrt{2\pi}\hbar^2\tilde{\omega}\tilde{\xi}} \frac{1}{[\zeta(3)]^{2/3} N^{1/3}} \sum_{k=1}^{\infty} \left\{ \frac{\sqrt{M}}{\sqrt{2\pi}\hbar} \frac{1}{k^2} - \frac{[\zeta(3)]^{1/6}}{4\sqrt{\hbar\tilde{\omega}\tilde{\xi}} N^{1/6}} \frac{1}{k^{3/2}} \exp\left[\frac{\hbar[\zeta(3)]^{1/3}k}{8M\tilde{\omega}N^{1/3}\tilde{\xi}^2}\right] \left[1 - \Phi\left(\sqrt{\frac{\hbar[\zeta(3)]^{1/3}k}{8M\tilde{\omega}N^{1/3}\tilde{\xi}^2}}\right)\right] \right\}. \quad (3.178)$$

Diesen Ausdruck kann man ihn mit den dimensionslosen Einheiten aus Gleichung (3.167) umschreiben, und erhält

$$\frac{\Delta T_c}{T_c^{(0)}} = \frac{1}{6\pi[\zeta(3)]^{2/3}} \frac{\tilde{R}}{\tilde{\xi}} \sum_{k=1}^{\infty} \left\{ \frac{1}{k^2} - \frac{[\zeta(3)]^{1/6}\sqrt{\pi}}{\sqrt{8\tilde{\xi}k^{3/2}}} \exp\left[\frac{[\zeta(3)]^{1/3}k}{8\tilde{\xi}^2}\right] \left[1 - \Phi\left(\sqrt{\frac{[\zeta(3)]^{1/3}k}{8\tilde{\xi}^2}}\right)\right] \right\}. \quad (3.179)$$

Für kleine Korrelationslänge erhält man mit Hilfe der Entwicklung (3.71) den Ausdruck

$$\frac{\Delta T_c}{T_c^{(0)}} = \frac{2}{3\pi} \tilde{R}\tilde{\xi}. \quad (\tilde{\xi} \rightarrow 0) \quad (3.180)$$

Für große Korrelationslänge hingegen erhält man

$$\frac{\Delta T_c}{T_c^{(0)}} = \frac{\zeta(2)}{6\pi[\zeta(3)]^{2/3}} \frac{\tilde{R}}{\tilde{\xi}}. \quad (\tilde{\xi} \rightarrow \infty) \quad (3.181)$$

Die normierte kritische Temperatur ist in Abbildung 3.7 aufgetragen, wobei auch hier, wie bei Annahme einer Lorentz-Korrelation des Zufallspotentials im freien Bose-Gas, die Berechnung mit Maple erfolgte [38].

Das Verhalten des Systems in der Falle bei Annahme von Lorentz-Korrelation ist also qualitativ genau wie im Fall der Gauß-Korrelation, siehe (3.168) und (3.169): Für $\xi = 0$ hat man keine Verschiebung. Bei kleiner Korrelationslänge wächst die Verschiebung dann zunächst linear der Korrelationslänge an, und fällt für große Korrelationslänge wie $1/\xi$ auf 0 ab. Es ist also auch hier ein Maximum der Verschiebung zu vorhanden, an der Stelle, an

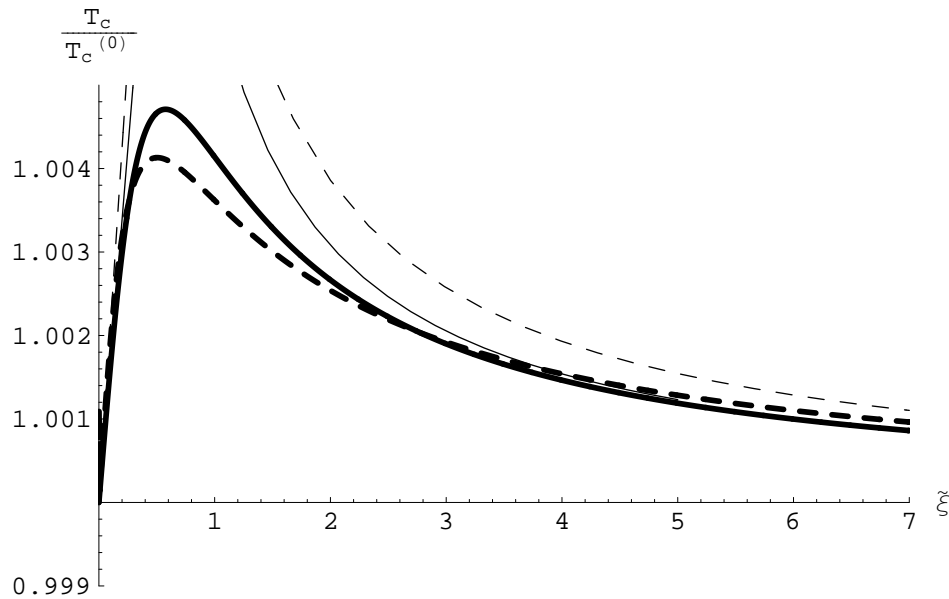


Abbildung 3.8: Normierte kritische Temperatur $T_c/T_c^{(0)}$ des Bose-Gases in einer harmonischen Falle für $\tilde{R} = 0, 1$ gegen die normierte Korrelationslänge $\tilde{\xi}$ aufgetragen. Die dicke durchgezogene Linie entspricht dabei der Gauß-Korrelation und die dicke gestrichelte Linie entspricht der Lorentz-Korrelation. Etwas dünner sind die jeweiligen Asymptoten eingezeichnet.

der die dominante Längenskala für kleine Korrelationslänge (Oszillatorlänge) in die dominante Längenskala für große Korrelationslänge (mittlerer Teilchenabstand) übergeht.

Wie im nächsten Abschnitt gezeigt wird, liegt die Kurve sehr nahe an derjenigen für die Gauß-Korrelation, weshalb zu erwarten ist, dass die Verschiebung der kritischen Temperatur experimentell beobachtbar sein sollte.

Vergleich der Korrelationen

In Abbildung 3.8 sind die Verschiebungen der kritischen Temperatur in einer harmonischen Falle für die Gauß-Korrelation und für die Lorentz-Korrelation gleichzeitig aufgetragen. Die Gauß-Korrelation wird hierbei durch die durchgezogene Linie dargestellt, und die Lorentz-Korrelation durch die gestrichelte Linie. Etwas dünner sind die jeweiligen Asymptoten dargestellt. Wie im Falle des freien Bose-Gases liegen beide Kurven sehr nahe beieinander.

Kapitel 4

Herleitung der Hartree-Fock-Bogoliubov-Gleichungen

In diesem Kapitel soll die in Kapitel 2 formulierte Quantenfeldtheorie ungeordneter Bosonen durch eine Molekularfeldtheorie approximiert werden. Dies geschieht für ein homogenes System ohne ein Fallenpotential $U(\mathbf{x})$. Dazu werden die Replika-Felder ψ_α in eine Summe aus Mittelwert und Fluktuationen zerlegt. Erwartungswerte von Produkten von Fluktuationen werden unter der Annahme Gaußscher Fluktuationen gemäß der Wick'schen Regel faktorisiert. Die hergeleiteten Gleichungen entsprechen im Falle ohne Unordnung den Hartree-Fock-Bogoliubov-Gleichungen, wie sie von Andersen [5] bzw. Griffin [40] hergeleitet werden, erweitern diese Gleichungen aber um die Unordnung.

4.1 Wirkung

Man geht von der unordnungsgemittelten Zustandssumme (2.53) aus,

$$\overline{\mathcal{Z}^N} = \left\{ \prod_{\alpha=1}^N \oint \mathcal{D}\psi_\alpha^* \oint \mathcal{D}\psi_\alpha \right\} e^{-\mathcal{A}^{(0)}[\psi^*, \psi]/\hbar} e^{-\mathcal{A}^{(\text{int})}[\psi^*, \psi]/\hbar} e^{-\mathcal{A}^{(\text{u})}[\psi^*, \psi]/\hbar}. \quad (4.1)$$

Hier ist

$$\mathcal{A}^{(\text{int})}[\psi^*, \psi] = \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \int d^D x' \sum_{\alpha=1}^N \psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \psi_\alpha^*(\mathbf{x}', \tau) U_{\text{int}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \psi_\alpha(\mathbf{x}', \tau) \quad (4.2)$$

und

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^{(\text{u})}[\psi^*, \psi] &= -\frac{1}{2\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x \int d^D x' R(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \\ &\quad \times \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\alpha'=1}^N \psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau'), \end{aligned} \quad (4.3)$$

während weiterhin

$$\mathcal{A}^{(0)}[\psi^*, \psi] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \sum_{\alpha=1}^N \psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta - \mu \right] \psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \quad (4.4)$$

gilt. Hierbei wurde angenommen, dass man sich im homogenen Bose-Gas befindet, d.h. mit verschwindendem Fallenpotential $U(\mathbf{x})$. $U_{\text{int}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ ist das verallgemeinerte Wechselwirkungspotential, welches in Kapitel 2 angesprochen wurde. Man kann sich leicht davon überzeugen, dass für ein Wechselwirkungspotential

$$U_{\text{int}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = g \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (4.5)$$

die bekannte Teilwirkung (2.50) herleitbar ist. Im Folgenden wird, da keine Falle vorhanden ist, der Index int unterdrückt. Außerdem gilt

$$U(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = U(\mathbf{x}' - \mathbf{x}). \quad (4.6)$$

Zunächst werden die Felder in Hintergrundfelder, das sind Molekularfelder, und deren Fluktuationen aufgespalten, also

$$\begin{aligned} \psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) &= \Psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) + \delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau), \\ \psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) &= \Psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) + \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau). \end{aligned} \quad (4.7)$$

Der Erwartungswert der Fluktuationen $\delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau)$ und $\delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau)$ soll verschwinden, also

$$\langle \delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \rangle = 0 = \langle \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \rangle. \quad (4.8)$$

Hierbei wird die Definition des Erwartungswertes in (4.15) nachgeliefert. Die Gesamtwirkung

$$\mathcal{A}[\delta\psi^*, \delta\psi] = \mathcal{A}^{(0)}[\delta\psi^*, \delta\psi] + \mathcal{A}^{(\text{int})}[\delta\psi^*, \delta\psi] + \mathcal{A}^{(\text{u})}[\delta\psi^*, \delta\psi] \quad (4.9)$$

ist dann gegeben durch

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^{(0)}[\delta\psi^*, \delta\psi] &= \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \sum_{\alpha=1}^N \left\{ \Psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta - \mu \right] \Psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \right. \\ &\quad + \Psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta - \mu \right] \delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) + \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta - \mu \right] \Psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \\ &\quad \left. + \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta - \mu \right] \delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \right\} \end{aligned} \quad (4.10)$$

sowie

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^{(\text{int})}[\delta\psi^*, \delta\psi] &= \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \int d^D x' \sum_{\alpha=1}^N U(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \left[\Psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_\alpha^*(\mathbf{x}', \tau) \Psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \Psi_\alpha(\mathbf{x}', \tau) \right. \\ &\quad + 2\Psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_\alpha^*(\mathbf{x}', \tau) \Psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_\alpha(\mathbf{x}', \tau) + 2\Psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \Psi_\alpha(\mathbf{x}', \tau) \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}', \tau) \\ &\quad + \Psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_\alpha^*(\mathbf{x}', \tau) \delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_\alpha(\mathbf{x}', \tau) + \Psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \Psi_\alpha(\mathbf{x}', \tau) \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}', \tau) \\ &\quad + 2\Psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}', \tau) \delta\psi_\alpha(\mathbf{x}', \tau) + 2\Psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_\alpha(\mathbf{x}', \tau) \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}', \tau) \delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \\ &\quad + 2\Psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}', \tau) \delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_\alpha(\mathbf{x}', \tau) + 2\Psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}', \tau) \delta\psi_\alpha(\mathbf{x}', \tau) \\ &\quad \left. + \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}', \tau) \delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_\alpha(\mathbf{x}', \tau) \right] \end{aligned} \quad (4.11)$$

und

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^{(\text{u})}[\delta\psi^*, \delta\psi] &= -\frac{1}{2\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x \int d^D x' R(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\alpha'=1}^N \\ &\quad \left[\Psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_\alpha^*(\mathbf{x}', \tau) \Psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \Psi_\alpha(\mathbf{x}', \tau') \right. \\ &\quad + 2\Psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_\alpha^*(\mathbf{x}', \tau') \Psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') + 2\Psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') \delta\psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \\ &\quad + \Psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_\alpha^*(\mathbf{x}', \tau') \delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') + \Psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \\ &\quad + 2\Psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \delta\psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') + 2\Psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') \delta\psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \\ &\quad + 2\Psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') + 2\Psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \delta\psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') \\ &\quad \left. + \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') \right]. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Man nähert nun Produkte von Fluktuationen höherer als 2. Ordnung mit Hilfe Gaußscher Faktorisierung durch Glieder linear und quadratisch in den Fluktuationenfeldern an. Dabei ist zu beachten, dass sich der Erwartungswert der so genäherten Terme nicht ändert. Ebenfalls zu beachten ist, dass die Erwartungswerte normalgeordnet sind, da sie aus einem normalgeordneten Hamilton-Operator abgeleitet werden. Dies führt zu Einführung von τ^+ in den Erwartungswerten, welche nichtkommutierende Operatoren enthalten, damit zeitgeordnete in normalgeordnete Produkte überführt werden. Damit gilt für den kubischen Term

$$\begin{aligned} & \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau)\delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau)\delta\psi_\alpha(\mathbf{x}', \tau) \\ \approx & \langle \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau^+)\delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \rangle \delta\psi_\alpha(\mathbf{x}', \tau) + \langle \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau^+)\delta\psi_\alpha(\mathbf{x}', \tau) \rangle \delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \\ & + \langle \delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau)\delta\psi_\alpha(\mathbf{x}', \tau) \rangle \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau), \end{aligned} \quad (4.13)$$

und entsprechend für den quartischen Term

$$\begin{aligned} & \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau)\delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}', \tau)\delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau)\delta\psi_\alpha(\mathbf{x}', \tau) \\ \approx & \langle \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau^+)\delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \rangle \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}', \tau)\delta\psi_\alpha(\mathbf{x}', \tau) + \langle \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau^+)\delta\psi_\alpha(\mathbf{x}', \tau) \rangle \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}', \tau)\delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \\ & + \langle \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}', \tau^+)\delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \rangle \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau)\delta\psi_\alpha(\mathbf{x}', \tau) + \langle \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}', \tau^+)\delta\psi_\alpha(\mathbf{x}', \tau) \rangle \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau)\delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \\ & + \langle \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau)\delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}', \tau) \rangle \delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau)\delta\psi_\alpha(\mathbf{x}', \tau) + \langle \delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau)\delta\psi_\alpha(\mathbf{x}', \tau) \rangle \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau)\delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}', \tau) \\ & - \langle \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}', \tau^+)\delta\psi_\alpha(\mathbf{x}', \tau) \rangle \langle \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau^+)\delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \rangle - \langle \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}', \tau^+)\delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \rangle \langle \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau^+)\delta\psi_\alpha(\mathbf{x}', \tau) \rangle \\ & - \langle \delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau)\delta\psi_\alpha(\mathbf{x}', \tau) \rangle \langle \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau)\delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}', \tau) \rangle. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Analog werden die anderen Multiplikationen von drei oder vier Fluktuationen genähert. Die Korrelationen sind hierbei gegeben durch die Definition des Erwartungswertes

$$\langle \bullet \rangle = \left[\prod_{\alpha=1}^N \oint \mathcal{D}\delta\psi_\alpha^* \oint \mathcal{D}\delta\psi_\alpha \right] \bullet e^{-\tilde{\mathcal{A}}[\delta\psi^*, \delta\psi]/\hbar} \left\{ \left[\prod_{\alpha=1}^N \oint \mathcal{D}\delta\psi_\alpha^* \oint \mathcal{D}\delta\psi_\alpha \right] e^{-\tilde{\mathcal{A}}[\delta\psi^*, \delta\psi]/\hbar} \right\}^{-1}, \quad (4.15)$$

wobei $\tilde{\mathcal{A}}[\delta\psi^*, \delta\psi]$ sämtliche Fluktuationsterme enthält. Auf die explizite Form der reduzierten Wirkung $\tilde{\mathcal{A}}$ wird später eingegangen (siehe Gleichung (4.28)). Gleichzeitig benutzt man, dass die Hintergrundfelder durch Extremalisierung der Wirkung entstanden sind. Folglich verschwinden alle Terme linear in den Fluktuationen, und mit der obigen Näherung die Terme mit drei Fluktuationen ebenfalls. Übrig bleiben nur Terme, die von nullter Ordnung oder quadratisch in den Fluktuationen sind, d.h. die Wirkungen

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^{(0)}[\delta\psi^*, \delta\psi] &= \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \sum_{\alpha=1}^N \left\{ \Psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta - \mu \right] \Psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \right. \\ &\quad \left. + \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta - \mu \right] \delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \right\} \end{aligned} \quad (4.16)$$

sowie

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}^{(\text{int})}[\delta\psi^*, \delta\psi] &= \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \int d^D x' \sum_{\alpha=1}^N U(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \left[\Psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}', \tau) \Psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha}(\mathbf{x}', \tau) \right. \\
&+ \left(\Psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}', \tau) + \langle \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}', \tau) \rangle \right) \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}', \tau) \\
&+ \left(\Psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha}(\mathbf{x}', \tau) + \langle \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}', \tau) \rangle \right) \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}', \tau) \\
&+ 2 \left(\Psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) + \langle \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau^+) \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \rangle \right) \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}', \tau) \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}', \tau) \\
&+ 2 \left(\Psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha}(\mathbf{x}', \tau) + \langle \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau^+) \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}', \tau) \rangle \right) \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}', \tau) \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \\
&- \langle \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau^+) \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \rangle \langle \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}', \tau^+) \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}', \tau) \rangle \\
&- \langle \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}', \tau^+) \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \rangle \langle \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau^+) \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}', \tau) \rangle \\
&\left. - \langle \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}', \tau) \rangle \langle \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}', \tau) \rangle \right] \quad (4.17)
\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}^{(\text{u})}[\delta\psi^*, \delta\psi] &= \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x \int d^D x' \sum_{\alpha=1}^N R(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \left[\Psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \Psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') \right. \\
&+ \left(\Psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') + \langle \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \rangle \right) \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') \\
&+ \left(\Psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') + \langle \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') \rangle \right) \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \\
&+ 2 \left(\Psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) + \langle \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau^+) \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \rangle \right) \delta\psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \delta\psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') \\
&+ 2 \left(\Psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') + \langle \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau^+) \delta\psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') \rangle \right) \delta\psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \\
&- \langle \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau^+) \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \rangle \langle \delta\psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau^+) \delta\psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') \rangle \\
&- \langle \delta\psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau^+) \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \rangle \langle \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau^+) \delta\psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') \rangle \\
&\left. - \langle \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \rangle \langle \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') \rangle \right]. \quad (4.18)
\end{aligned}$$

Man führt nun die Abkürzungen

$$K_{\alpha\alpha'}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = \langle \delta\psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \rangle, \quad (4.19)$$

$$\sigma_{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau) = K_{\alpha\alpha}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau^+), \quad (4.20)$$

$$s_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) = \sigma_{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{x}, \tau), \quad (4.21)$$

$$\Theta_{\alpha\alpha'}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = \langle \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') \rangle, \quad (4.22)$$

$$\Theta_{\alpha\alpha'}^*(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = \langle \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \rangle, \quad (4.23)$$

$$\xi_{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau) = \Theta_{\alpha\alpha}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau), \quad (4.24)$$

$$\xi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau) = \Theta_{\alpha\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau) \quad (4.25)$$

ein. Sie werden im Folgenden stets "Felder" genannt werden, auch wenn es an dieser Stelle genau genommen nur Abkürzungen sind. Durch Extremalisierung des noch herzuleitenden effektiven Potentials (4.30) werden diese Gleichungen reproduziert, d.h. diese Nebenbedingungen sind später erfüllt. Damit kann man den Wechselwirkungs-

und Unordnungsteil der Wirkung wie folgt hinschreiben:

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}^{(\text{int})}[\delta\psi^*, \delta\psi] &= \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \int d^D x' \sum_{\alpha=1}^N U(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \left[\Psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_\alpha^*(\mathbf{x}', \tau) \Psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \Psi_\alpha(\mathbf{x}', \tau) \right. \\
&+ (\Psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_\alpha^*(\mathbf{x}', \tau) + \xi_\alpha^*(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau)) \delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_\alpha(\mathbf{x}', \tau) \\
&+ (\Psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \Psi_\alpha(\mathbf{x}', \tau) + \xi_\alpha(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau)) \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}', \tau) \\
&+ 2(\Psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) + s_\alpha(\mathbf{x}, \tau)) \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}', \tau) \delta\psi_\alpha(\mathbf{x}', \tau) \\
&+ 2(\Psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_\alpha(\mathbf{x}', \tau) + \sigma_\alpha(\mathbf{x}', \mathbf{x}, \tau)) \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}', \tau) \delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \\
&\left. - s_\alpha(\mathbf{x}, \tau) s_\alpha(\mathbf{x}', \tau) - \sigma_\alpha(\mathbf{x}', \mathbf{x}, \tau) \sigma_\alpha(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau) - \xi_\alpha(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau) \xi_\alpha^*(\mathbf{x}', \mathbf{x}, \tau) \right] \quad (4.26)
\end{aligned}$$

sowie

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}^{(\text{u})}[\delta\psi^*, \delta\psi] &= -\frac{1}{2\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x \int d^D x' \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\alpha'=1}^N R(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \\
&\left[\Psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \Psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') \right. \\
&+ (\Psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') + \Theta_{\alpha\alpha'}^*(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau')) \delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') \\
&+ (\Psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') + \Theta_{\alpha\alpha'}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau')) \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \\
&+ 2(\Psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) + s_\alpha(\mathbf{x}, \tau)) \delta\psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \delta\psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') \\
&+ 2(\Psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \Psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) + K_{\alpha\alpha'}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau')) \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') \\
&- s_\alpha(\mathbf{x}, \tau) s_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') - K_{\alpha\alpha'}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') K_{\alpha'\alpha}(\mathbf{x}', \tau'; \mathbf{x}, \tau) \\
&\left. - \Theta_{\alpha\alpha'}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') \Theta_{\alpha'\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') \right]. \quad (4.27)
\end{aligned}$$

Nun kann man die in (4.15) angesprochene Wirkung $\tilde{\mathcal{A}}[\delta\psi^*, \delta\psi]$ ablesen:

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{A}}[\delta\psi^*, \delta\psi] &= \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \sum_{\alpha=1}^N \left\{ \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta - \mu \right] \delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \right. \\
&+ \frac{1}{2} \int d^D x' U(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \left[(\Psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_\alpha^*(\mathbf{x}', \tau) + \xi_\alpha^*(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau)) \delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_\alpha(\mathbf{x}', \tau) \right. \\
&+ (\Psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \Psi_\alpha(\mathbf{x}', \tau) + \xi_\alpha(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau)) \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}', \tau) \\
&+ 2(\Psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) + s_\alpha(\mathbf{x}, \tau)) \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}', \tau) \delta\psi_\alpha(\mathbf{x}', \tau) \\
&\left. + 2(\Psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_\alpha(\mathbf{x}', \tau) + \sigma_\alpha(\mathbf{x}', \mathbf{x}, \tau)) \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}', \tau) \delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \right] \left. \right\} \\
&- \frac{1}{2\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x \int d^D x' \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\alpha'=1}^N R(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \\
&\times \left\{ 2(\Psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) + s_\alpha(\mathbf{x}, \tau)) \delta\psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \delta\psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') \right. \\
&+ 2(\Psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \Psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) + K_{\alpha\alpha'}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau')) \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') \\
&+ (\Psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') + \Theta_{\alpha\alpha'}^*(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau')) \delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') \\
&\left. + (\Psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') + \Theta_{\alpha\alpha'}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau')) \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \right\}. \quad (4.28)
\end{aligned}$$

4.2 Gross-Pitaevskii-Gleichung und Teilchendichte

Man definiert nun das von den mittleren Feldern abhängige effektive Potential

$$V_{\text{eff}}^{(N)} = -\frac{1}{\beta} \ln \overline{\mathcal{Z}^N} \quad (4.29)$$

mittels des Ausdrucks für die Zustandssumme (2.53) und mit Hilfe der hergeleiteten Teilwirkungen (4.16), (4.26) und (4.27) unter Beachtung der Gesamtwirkung (4.9). Das großkanonische Potential Ω ist aus V_{eff} durch Minimierung bezüglich der mittleren Felder zu bestimmen, $\Omega = V_{\text{eff}} \Big|_{\text{min}}$. Damit ist dann

$$\begin{aligned} V_{\text{eff}}^{(N)} = & \frac{1}{\hbar\beta} \left\{ \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \sum_{\alpha=1}^N \Psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta - \mu \right] \Psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \right. \\ & + \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \int d^D x' \sum_{\alpha=1}^N U(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \left[\Psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}', \tau) \Psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha}(\mathbf{x}', \tau) \right. \\ & - s_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) s_{\alpha}(\mathbf{x}', \tau) - \sigma_{\alpha}(\mathbf{x}', \mathbf{x}, \tau) \sigma_{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau) - \xi_{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau) \xi_{\alpha}^*(\mathbf{x}', \mathbf{x}, \tau) \left. \right] \\ & - \frac{1}{2\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x \int d^D x' \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\alpha'=1}^N R(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \left[\Psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \Psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') \right. \\ & - s_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) s_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') - K_{\alpha\alpha'}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') K_{\alpha'\alpha}(\mathbf{x}', \tau'; \mathbf{x}, \tau) - \Theta_{\alpha\alpha'}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') \Theta_{\alpha\alpha'}^*(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') \left. \right] \left. \right\} \\ & - \frac{1}{\beta} \ln \left\{ \left[\prod_{\alpha=1}^N \oint \mathcal{D}\delta\psi_{\alpha}^* \oint \mathcal{D}\delta\psi_{\alpha} \right] e^{-\tilde{\mathcal{A}}[\delta\psi^*, \delta\psi]/\hbar} \right\}. \quad (4.30) \end{aligned}$$

Leitet man das so definierte effektive Potential funktional nach den Molekularfeldern $\Psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau)$ bzw. $\Psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau)$ ab, so erhält man die Gross-Pitaevskii-Gleichung. Bei funktionaler Ableitung nach den Feldern reproduziert man nun die Feldgleichungen (4.19)–(4.25), die diesen Namen jetzt zu Recht tragen. Anders ausgedrückt muss man die implizite Abhängigkeit der Felder von den anderen Feldern beim Ableiten nicht mehr beachten, da die funktionale Ableitung nach diesen diese theoretisch auftauchenden Terme verschwinden lässt. In das Ergebnis für die Gross-Pitaevskii-Gleichung wird sofort eingesetzt, dass die Molekularfelder für das Kondensat, Ψ_{α} und Ψ_{α}^* , auf Grund der fehlenden Falle nicht orts- und imaginärzeitabhängig sein sollten, d.h.

$$\begin{aligned} \Psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) & \equiv \Psi_{\alpha}, \\ \Psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) & \equiv \Psi_{\alpha}^*. \end{aligned} \quad (4.31)$$

Das Ergebnis für die Gross-Pitaevskii-Gleichung ist dann

$$\begin{aligned} & \left[-\mu + \int d^D x' \sigma_{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau) U(\mathbf{x} - \mathbf{x}') + \int d^D x' s_{\alpha}(\mathbf{x}', \tau) U(\mathbf{x} - \mathbf{x}') + \Psi_{\alpha}^* \Psi_{\alpha} \int d^D x' U(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \right] \Psi_{\alpha} \\ & + \left[\int d^D x' \xi_{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau) U(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \right] \Psi_{\alpha}^* \\ = & \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x' \sum_{\alpha'=1}^N R(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \left[\Psi_{\alpha'}^* \Psi_{\alpha} \Psi_{\alpha'} + K_{\alpha\alpha'}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') \Psi_{\alpha'} \right. \\ & \left. + s_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') \Psi_{\alpha} + \Theta_{\alpha\alpha'}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') \Psi_{\alpha'}^* \right]. \quad (4.32) \end{aligned}$$

Man sucht nun eine replikasymmetrische Lösung, die zudem auf Grund der Homogenität in Raum und Imaginärzeit nur von der Differenz der Raum- und Zeitkoordinaten abhängig ist. Für die Felder ergibt sich dann

$$\Psi_\alpha \equiv \Psi, \quad (4.33)$$

$$\Psi_\alpha^* \equiv \Psi^*, \quad (4.34)$$

$$K_{\alpha\alpha'}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') \equiv K(\mathbf{x} - \mathbf{x}', \tau - \tau')\delta_{\alpha\alpha'} + \kappa(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (4.35)$$

$$\sigma_\alpha(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau) \equiv \sigma(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = K(\mathbf{x} - \mathbf{x}', 0^-) + \kappa(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (4.36)$$

$$s_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \equiv s, \quad (4.37)$$

$$\Theta_{\alpha\alpha'}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') \equiv \Theta(\mathbf{x} - \mathbf{x}', \tau - \tau')\delta_{\alpha\alpha'} + \theta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (4.38)$$

$$\Theta_{\alpha\alpha'}^*(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') \equiv \Theta^*(\mathbf{x}' - \mathbf{x}, \tau' - \tau)\delta_{\alpha\alpha'} + \theta^*(\mathbf{x}' - \mathbf{x}), \quad (4.39)$$

$$\xi_\alpha(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau) \equiv \xi(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \Theta(\mathbf{x} - \mathbf{x}', 0) + \theta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (4.40)$$

$$\xi_\alpha^*(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau) \equiv \xi^*(\mathbf{x}' - \mathbf{x}). \quad (4.41)$$

Die Bezeichnung 0^- bedeutet hier wiederum einen Limes kleiner η von $(0 - \eta)$. Zusätzlich ist wegen $U(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = U(\mathbf{x}' - \mathbf{x})$ und $R(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = R(\mathbf{x}' - \mathbf{x})$ zu schließen, dass die Raumkoordinaten nicht mit ihrem Vorzeichen in die Wechselwirkung eingehen, d.h. auf der rechten Seite der obigen Identitäten darf man stets \mathbf{x} und \mathbf{x}' vertauschen. Schließlich identifiziert man noch den Betrag der Molekularfelder Ψ und Ψ^* mit der Dichte der kondensierten Atome, d.h.

$$\begin{aligned} \Psi &= \sqrt{n_0}e^{i\phi}, \\ \Psi^* &= \sqrt{n_0}e^{-i\phi}. \end{aligned} \quad (4.42)$$

Die Phase ϕ ist wegen der Eichinvarianz beliebig und könnte im Folgenden als $\phi = 0$ gewählt werden. Da die Phasenabhängigkeit bei der späteren Herleitung der superfluiden Dichte zur Wiedererkennung der Gleichungen wichtig ist, wird dies an dieser Stelle noch nicht gemacht. Die Molekularfelder K und Θ werden nun mit einer Matsubara-Zerlegung behandelt:

$$\begin{aligned} K(\mathbf{x} - \mathbf{x}', \tau - \tau') &= \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_m(\tau-\tau')} K_m(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \\ \Theta(\mathbf{x} - \mathbf{x}', \tau - \tau') &= \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_m(\tau-\tau')} \Theta_m(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \\ \Theta^*(\mathbf{x}' - \mathbf{x}, \tau' - \tau) &= \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_m(\tau-\tau')} \Theta_m^*(\mathbf{x}' - \mathbf{x}), \end{aligned} \quad (4.43)$$

mit

$$\omega_m = \frac{2\pi}{\hbar\beta} m. \quad (4.44)$$

Dies ist auf Grund der Periodizität der Felder in der Imaginärzeit, $\tau \rightarrow \tau + \hbar\beta$, möglich (2.23). Diese transformierten Felder können nun in die Gross-Pitaevskii-Gleichung eingesetzt werden. Im Replika-Limes $N \rightarrow 0$ fallen κ , θ und der Ψ_α -Term auf der rechten Seite der Gross-Pitaevskii-Gleichung (4.32) weg. Nach Integration über τ fallen auch alle Terme mit $\omega_m \neq 0$ weg. Man erhält dann

$$\begin{aligned} &\left[-\mu + \int d^D x' \sigma(\mathbf{x} - \mathbf{x}') U(\mathbf{x} - \mathbf{x}') + s \int d^D x' U(\mathbf{x} - \mathbf{x}') + n_0 \int d^D x' U(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \right] \sqrt{n_0} e^{i\phi} \\ &+ \left[\int d^D x' \xi(\mathbf{x} - \mathbf{x}') U(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \right] \sqrt{n_0} e^{-i\phi} \\ &= \frac{1}{\hbar} \int d^D x' R(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \left[K_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}') e^{i\phi} + \Theta_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}') e^{-i\phi} \right] \sqrt{n_0}. \end{aligned} \quad (4.45)$$

Schließlich ist es interessant, die Gleichung für die Teilchendichte zu bestimmen. Dies geschieht mittels Ableitung des effektiven Potentials nach dem chemischen Potential, also

$$n = - \frac{1}{V} \frac{\partial V_{\text{eff}}}{\partial \mu} \Big|_{T, V = \text{const}} \quad (4.46)$$

Eigentlich müsste an dieser Stelle das großkanonische Potential Ω abgeleitet werden, d.h. in die rechte Seite der obigen Gleichung ist die Lösung des Extremalproblems einzusetzen. Die partiellen Ableitungen des effektiven Potentials nach den Feldern, ausgewertet am Minimum, verschwinden jedoch auf Grund der Extremalitätseigenschaft des großkanonischen Potentials, und man reproduziert lediglich die Feldgleichungen (4.19)–(4.25) sowie die Gross-Pitaevskii-Gleichung (4.45). Daher ist eine partielle Ableitung des effektiven Potentials nach dem chemischen Potential äquivalent zur Ableitung des großkanonischen Potentials. Das Ergebnis für die Teilchendichte lautet

$$n = n_0 + \langle \delta\psi^*(\mathbf{x}, \tau^+) \delta\psi(\mathbf{x}, \tau) \rangle = n_0 + s. \quad (4.47)$$

Man könnte das Feld s nun durch $n - n_0$ eliminieren. Trotzdem soll die Bezeichnung beibehalten werden, um die Zugehörigkeit zum Feld σ zu demonstrieren. Damit wird sofort deutlich, dass es einen Hartree- und einen Fock-Beitrag der Wechselwirkung gibt.

Der für diese Arbeit wichtigste Spezialfall ist der einer lokalen Wechselwirkung und räumlich unkorrelierten Unordnung, d.h.

$$\begin{aligned} U(\mathbf{x} - \mathbf{x}') &= g\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \\ R(\mathbf{x} - \mathbf{x}') &= R\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \end{aligned} \quad (4.48)$$

Die dann resultierenden Gleichungen sind die Hartree-Fock-Bogoliubov-Gleichungen, erweitert durch Unordnung. Sie werden in Abschnitt 4.4 hergeleitet. Da das Argument $(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ der Felder dann verschwindet, wird es in der Notation unterdrückt, um genau zu sein gilt

$$\begin{aligned} \sigma &:= \sigma(\mathbf{0}), \\ \xi &:= \xi(\mathbf{0}), \\ K_0 &:= K_0(\mathbf{0}), \\ \Theta_0 &:= \Theta_0(\mathbf{0}), \\ \Theta_0^* &:= \Theta_0^*(\mathbf{0}), \\ \theta &:= \theta(\mathbf{0}), \\ \theta^* &:= \theta^*(\mathbf{0}), \\ \kappa &:= \kappa(\mathbf{0}), \\ \kappa^* &:= \kappa^*(\mathbf{0}). \end{aligned} \quad (4.49)$$

Bei Wahl von $\phi = 0$ erhält man für die verallgemeinerte Gross-Pitaevskii-Gleichung

$$[-\mu + g\sigma + gs + g\xi + gn_0] \sqrt{n_0} = \frac{R}{\hbar} [K_0 + \Theta_0] \sqrt{n_0} \quad (4.50)$$

mit

$$\sigma = s = n - n_0. \quad (4.51)$$

4.3 Korrelationen

In den Gleichungen, welche die mittleren Felder definieren, stehen die normalen und anormalen Korrelationen. Diese müssen zunächst berechnet werden, bevor die Gleichungen vollständig aufgeschrieben werden können. Dazu betrachte man zunächst die reduzierte Wirkung (4.28). Sie enthält den Term $-T$ mit

$$T = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x \int d^D x' \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\alpha'=1}^N R(\mathbf{x}-\mathbf{x}') (\Psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) + s_\alpha(\mathbf{x}, \tau)) \delta\psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \delta\psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau'), \quad (4.52)$$

welcher zunächst umgeschrieben werden soll. Bei Annahme von Replikasymmetrie (4.37) lässt sich dies schreiben als

$$T = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x \int d^D x' \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\alpha'=1}^N R(\mathbf{x}-\mathbf{x}') (n_0 + s) \delta\psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \delta\psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau'). \quad (4.53)$$

Integration über x liefert nun die Fouriertransformierte von R an der Stelle $\mathbf{k} = \mathbf{0}$. Integration über τ bringt einen Faktor $\hbar\beta$. Die Summe über α liefert einen Faktor N . Damit ist (4.53)

$$T = \hbar\beta N \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x' \sum_{\alpha'=1}^N R(\mathbf{k} = \mathbf{0}) (n_0 + s) \delta\psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \delta\psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau'). \quad (4.54)$$

Dies kann man schreiben als

$$T = \hbar\beta N \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x \int d^D x' \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\alpha'=1}^N R(\mathbf{k} = \mathbf{0}) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(\tau - \tau') \delta_{\alpha\alpha'} (n_0 + s) \delta\psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau). \quad (4.55)$$

Zwecks Berechnung der Korrelationen schreibe man nun also die reduzierte Wirkung (4.28) unter Berücksichtigung der Umformung (4.55) als Integral über einen Integralkern:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{A}}[\delta\psi^*, \delta\psi] &= \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x \int d^D x' \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\alpha'=1}^N \\ &\quad \frac{1}{2} \left\{ \begin{pmatrix} \delta\psi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) & \delta\psi_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \end{pmatrix} G_{\alpha\alpha'}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') \begin{pmatrix} \delta\psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') \\ \delta\psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \end{pmatrix} \right\}. \end{aligned} \quad (4.56)$$

Dies führt auch auf die Matrix der Greenschen Funktion (4.79). Der Integralkern, also die Matrix der inversen Greenschen Funktion $G_{\alpha\alpha'}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau')$, ist hierbei definiert durch

$$\begin{aligned} G_{\alpha\alpha'}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') &= \delta_{\alpha\alpha'} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(\tau - \tau') \begin{pmatrix} \hbar \frac{\partial}{\partial \tau'} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta' - \mu & 0 \\ 0 & -\hbar \frac{\partial}{\partial \tau'} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta' - \mu \end{pmatrix} \\ &+ \delta_{\alpha\alpha'} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(\tau - \tau') \begin{pmatrix} -\beta N R(\mathbf{k} = \mathbf{0}) (n_0 + s) & 0 \\ 0 & -\beta N R(\mathbf{k} = \mathbf{0}) (n_0 + s) \end{pmatrix} \\ &+ \delta_{\alpha\alpha'} \delta(\tau - \tau') \begin{pmatrix} U(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) [2n_0 + s + \sigma(\mathbf{x}' - \mathbf{x})] & U(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) [n_0 e^{2i\phi} + \xi(\mathbf{x} - \mathbf{x}')] \\ U(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) [n_0 e^{-2i\phi} + \xi^*(\mathbf{x}' - \mathbf{x})] & U(\mathbf{x} - \mathbf{x}') [2n_0 + s + \sigma(\mathbf{x} - \mathbf{x}')] \end{pmatrix} \\ &- \delta_{\alpha\alpha'} \frac{1}{\hbar} \begin{pmatrix} R(\mathbf{x} - \mathbf{x}') K(\mathbf{x} - \mathbf{x}', \tau - \tau') & R(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \Theta(\mathbf{x} - \mathbf{x}', \tau - \tau') \\ R(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \Theta^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}', \tau - \tau') & R(\mathbf{x} - \mathbf{x}') K^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}', \tau - \tau') \end{pmatrix} \\ &- \frac{1}{\hbar} \begin{pmatrix} R(\mathbf{x} - \mathbf{x}') (n_0 + \kappa(\mathbf{x} - \mathbf{x}')) & R(\mathbf{x} - \mathbf{x}') (n_0 e^{2i\phi} + \theta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')) \\ R(\mathbf{x} - \mathbf{x}') (n_0 e^{-2i\phi} + \theta^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}')) & R(\mathbf{x} - \mathbf{x}') (n_0 + \kappa^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}')) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.57)$$

Man definiert die Fouriertransformierte einer Funktion durch

$$f(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} f(\mathbf{k}). \quad (4.58)$$

Falls gilt:

$$f(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = f(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) \quad (4.59)$$

dann folgt

$$f(\mathbf{k}) = f(-\mathbf{k}). \quad (4.60)$$

Dies gilt an dieser Stelle insbesondere für alle Felder.

Die Definition des Fourier-Matsubara-transformierten Integralkerns $G_{\alpha\alpha'}^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m)$ lautet wie bekannt

$$G_{\alpha\alpha'}^{-1}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) = \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_m(\tau-\tau')} \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} G_{\alpha\alpha'}^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m) \quad (4.61)$$

Dessen Struktur liest sich also wie

$$G_{\alpha\alpha'}^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m) = \begin{pmatrix} a(\mathbf{k}, \omega_m) & d(\mathbf{k}, \omega_m) \\ d^*(\mathbf{k}, \omega_m) & a^*(\mathbf{k}, \omega_m) \end{pmatrix} \delta_{\alpha\alpha'} + \begin{pmatrix} b(\mathbf{k}, \omega_m) & c(\mathbf{k}, \omega_m) \\ c^*(\mathbf{k}, \omega_m) & b^*(\mathbf{k}, \omega_m) \end{pmatrix} \quad (4.62)$$

unter Beachtung der Transformation von K und Θ in (4.43) mit den Bezeichnungen

$$\begin{aligned} a(\mathbf{k}, \omega_m) &= -i\hbar\omega_m + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu - \beta N R(\mathbf{k} = \mathbf{0})(n_0 + s) + \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} U(\mathbf{x}) [2n_0 + s + \sigma(\mathbf{x})] \\ &\quad - \frac{1}{\hbar} \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x}) K_m(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (4.63)$$

$$b(\mathbf{k}, \omega_m) = -\beta\delta_{m,0} \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x})(n_0 + \kappa(\mathbf{x})), \quad (4.64)$$

$$c(\mathbf{k}, \omega_m) = -\beta\delta_{m,0} \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x})(n_0 e^{2i\phi} + \theta(\mathbf{x})), \quad (4.65)$$

$$d(\mathbf{k}, \omega_m) = \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} U(\mathbf{x})(n_0 e^{2i\phi} + \xi(\mathbf{x})) - \frac{1}{\hbar} \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x}) \Theta_m(\mathbf{x}). \quad (4.66)$$

Man möchte die Greensche Funktion $G_{\alpha\alpha'}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2)$ bestimmen, deren Definition lautet:

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \sum_{\alpha=1}^N G_{\alpha_1\alpha}^{-1}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}, \tau) G_{\alpha\alpha_2}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}_2, \tau_2) = \hbar\delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)\delta(\tau_1 - \tau_2)\delta_{\alpha_1\alpha_2}. \quad (4.67)$$

Im Fourier-Matsubara-Raum liest sich das als

$$\sum_{\alpha=1}^N G_{\alpha_1\alpha}^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m) G_{\alpha\alpha_2}(\mathbf{k}, \omega_m) = \hbar\delta_{\alpha_1\alpha_2}. \quad (4.68)$$

Die Fourier-Matsubara-Transformierte des Integralkerns schreibt man nun als

$$G_{\alpha_1\alpha_2}^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m) = g_1^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m)\delta_{\alpha_1\alpha_2} + g_2^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m). \quad (4.69)$$

Man macht nun folgenden Ansatz für die Fourier-Matsubara-Transformierte der Greenschen Funktion:

$$G_{\alpha_1\alpha_2}(\mathbf{k}, \omega_m) = g_1(\mathbf{k}, \omega_m)\delta_{\alpha_1\alpha_2} + g_2(\mathbf{k}, \omega_m). \quad (4.70)$$

Aus der Summe (4.68) ergeben sich dann im Replika-Limes $N \rightarrow 0$ die Gleichungen

$$g_1^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m)g_1(\mathbf{k}, \omega_m) = \hbar \quad (4.71)$$

und

$$g_2^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m)g_1(\mathbf{k}, \omega_m) + g_1^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m)g_2(\mathbf{k}, \omega_m) = 0. \quad (4.72)$$

Der letzte aus der Summe (4.68) theoretisch herleitbare Summand verschwindet für $N \rightarrow 0$. Außerdem beachte man, dass der Term proportional zu N in der Abkürzung (4.63) im Replika-Limes verschwindet. Also gilt ab jetzt eine Neudefinition von a :

$$a(\mathbf{k}, \omega_m) = -i\hbar\omega_m + \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2M} - \mu + \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}}U(\mathbf{x}) [2n_0 + s + \sigma(\mathbf{x})] - \frac{1}{\hbar} \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}}R(\mathbf{x})K_m(\mathbf{x}). \quad (4.73)$$

Die Matrizen $g_1(\mathbf{k}, \omega_m)$ und $g_2(\mathbf{k}, \omega_m)$ ergeben sich durch simple Matrixmanipulationen aus (4.71)

$$g_1(\mathbf{k}, \omega_m) = \hbar [g_1^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m)]^{-1} \quad (4.74)$$

und aus (4.72)

$$g_2(\mathbf{k}, \omega_m) = -\frac{1}{\hbar}g_1(\mathbf{k}, \omega_m)g_2^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m)g_1(\mathbf{k}, \omega_m). \quad (4.75)$$

Die Inverse der 2×2 -Matrix $g_1^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m)$ bestimmt sich zu

$$[g_1^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m)]^{-1} = \frac{1}{|a(\mathbf{k}, \omega_m)|^2 - |d(\mathbf{k}, \omega_m)|^2} \begin{pmatrix} a^*(\mathbf{k}, \omega_m) & -d(\mathbf{k}, \omega_m) \\ -d^*(\mathbf{k}, \omega_m) & a(\mathbf{k}, \omega_m) \end{pmatrix}, \quad (4.76)$$

und $g_2(\mathbf{k}, \omega_m)$ lässt sich durch eine Matrixmultiplikation bestimmen:

$$g_2(\mathbf{k}, \omega_m) = -\frac{\hbar}{(|a|^2 - |d|^2)^2} \begin{pmatrix} a^*a^*b - a^*cd^* - a^*c^*d + b^*dd^* & aa^*c - a^*bd - ab^*d + c^*dd \\ aa^*c^* - ab^*d^* - a^*bd^* + cd^*d^* & aab^* - ac^*d - acd^* + bdd^* \end{pmatrix}. \quad (4.77)$$

Der größeren Übersichtlichkeit wegen wurde hierbei auf die explizite Nennung der Abhängigkeit der Abkürzungen a , b , c und d von Wellenvektor \mathbf{k} und Matsubara-Frequenz ω_m verzichtet. Sie sind aber nicht unabhängig davon. Die Transformierte der Greenschen Funktion im Replika-Limes ist also gegeben durch

$$G_{\alpha_1\alpha_2}(\mathbf{k}, \omega_m) = \frac{1}{|a|^2 - |d|^2} \begin{pmatrix} a^* & -d \\ -d^* & a \end{pmatrix} - \frac{\hbar}{(|a|^2 - |d|^2)^2} \begin{pmatrix} a^*a^*b - a^*cd^* - a^*c^*d + b^*dd^* & aa^*c - a^*bd - ab^*d + c^*dd \\ aa^*c^* - ab^*d^* - a^*bd^* + cd^*d^* & aab^* - ac^*d - acd^* + bdd^* \end{pmatrix}. \quad (4.78)$$

Die Greensche Funktion ist nun bekannt. Per Definitionem ist sie die Matrix der gesuchten Erwartungswerte:

$$G_{\alpha_1\alpha_2}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) = \begin{pmatrix} \langle \delta\psi_{\alpha_1}(\mathbf{x}_1, \tau_1)\delta\psi_{\alpha_2}^*(\mathbf{x}_2, \tau_2) \rangle & \langle \delta\psi_{\alpha_1}(\mathbf{x}_1, \tau_1)\delta\psi_{\alpha_2}(\mathbf{x}_2, \tau_2) \rangle \\ \langle \delta\psi_{\alpha_1}^*(\mathbf{x}_1, \tau_1)\delta\psi_{\alpha_2}^*(\mathbf{x}_2, \tau_2) \rangle & \langle \delta\psi_{\alpha_1}^*(\mathbf{x}_1, \tau_1)\delta\psi_{\alpha_2}(\mathbf{x}_2, \tau_2) \rangle \end{pmatrix}. \quad (4.79)$$

Damit sind die Korrelationen berechnet.

4.3.1 Normale Korrelation

Die normale Korrelation $\langle \delta\psi_{\alpha_1}(\mathbf{x}_1, \tau_1) \delta\psi_{\alpha_2}^*(\mathbf{x}_2, \tau_2) \rangle$ ergibt sich aus den beiden Ausdrücken für die Greensche Funktion (4.78) und (4.79) mit Hilfe der Abkürzungen (4.73) und (4.64) bis (4.66) zu

$$\begin{aligned}
K_{\alpha_1\alpha_2}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2, \tau_1 - \tau_2) &= \langle \delta\psi_{\alpha_1}(\mathbf{x}_1, \tau_1) \delta\psi_{\alpha_2}^*(\mathbf{x}_2, \tau_2) \rangle = \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_m(\tau_1 - \tau_2)} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)} \\
&\frac{\left[i\hbar\omega_m + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} U(\mathbf{x}) [2n_0 + s + \sigma(\mathbf{x})] - \frac{1}{\hbar} \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x}) K_m^*(\mathbf{x}) \right] \delta_{\alpha_1\alpha_2}}{\left[-i\hbar\omega_m + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} U(\mathbf{x}) [2n_0 + s + \sigma(\mathbf{x})] - \frac{1}{\hbar} \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x}) K_m(\mathbf{x}) \right]^2 - \dots} \dots \\
&\dots \frac{\dots - \left| \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} U(\mathbf{x}) (n_0 e^{2i\phi} + \xi(\mathbf{x})) - \frac{1}{\hbar} \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x}) \Theta_m(\mathbf{x}) \right|^2}{\dots} \\
&+ \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)} \\
&\left\{ \frac{\int d^D x (e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x}) (n_0 + \kappa(\mathbf{x}))) \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} U(\mathbf{x}) [2n_0 + s + \sigma(\mathbf{x})] - \frac{1}{\hbar} \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x}) K_0^*(\mathbf{x}) \right)^2 - \dots}{\left| \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} U(\mathbf{x}) [2n_0 + s + \sigma(\mathbf{x})] - \frac{1}{\hbar} \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x}) K_0(\mathbf{x}) \right|^2 - \dots} \dots \right. \\
&\dots \frac{\dots - \int d^D x (e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x}) (n_0 e^{2i\phi} + \theta(\mathbf{x}))) \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} U(\mathbf{x}) [2n_0 + s + \sigma(\mathbf{x})] - \frac{1}{\hbar} \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x}) K_0^*(\mathbf{x}) \right) \times \dots}{\dots - \left| \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} U(\mathbf{x}) (n_0 e^{2i\phi} + \xi(\mathbf{x})) - \frac{1}{\hbar} \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x}) \Theta_0(\mathbf{x}) \right|^2} \dots \\
&\dots \frac{\dots \times \left(\int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} U(\mathbf{x}) (n_0 e^{-2i\phi} + \xi^*(\mathbf{x})) - \frac{1}{\hbar} \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x}) \Theta_0^*(\mathbf{x}) \right)}{\dots} \\
&\dots \frac{- \int d^D x (e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x}) (n_0 e^{-2i\phi} + \theta^*(\mathbf{x}))) \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} U(\mathbf{x}) [2n_0 + s + \sigma(\mathbf{x})] - \dots}{\left| \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} U(\mathbf{x}) [2n_0 + s + \sigma(\mathbf{x})] - \frac{1}{\hbar} \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x}) K_0(\mathbf{x}) \right|^2 - \dots} \dots \right. \\
&\dots \frac{\dots - \frac{1}{\hbar} \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x}) K_0^*(\mathbf{x}) \left(\int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} U(\mathbf{x}) (2n_0 e^{2i\phi} + \xi(\mathbf{x})) - \frac{1}{\hbar} \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x}) \Theta_0(\mathbf{x}) \right) + \dots}{\dots - \left| \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} U(\mathbf{x}) (n_0 e^{2i\phi} + \xi(\mathbf{x})) - \frac{1}{\hbar} \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x}) \Theta_0(\mathbf{x}) \right|^2} \dots \\
&\dots \left. \frac{\dots + \int d^D x (e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x}) (n_0 + \kappa^*(\mathbf{x}))) \left| \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} U(\mathbf{x}) (n_0 e^{2i\phi} + \xi(\mathbf{x})) - \frac{1}{\hbar} \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x}) \Theta_0(\mathbf{x}) \right|^2}{\dots} \right\}. \tag{4.80}
\end{aligned}$$

4.3.2 Anormale Korrelationen

Für die anormale Korrelation $\langle \delta\psi_{\alpha_1}(\mathbf{x}_1, \tau_1) \delta\psi_{\alpha_2}(\mathbf{x}_2, \tau_2) \rangle$ erhält man auf die gleiche Weise wie bei der normalen Korrelation

$$\begin{aligned}
\Theta_{\alpha_1\alpha_2}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2, \tau_1 - \tau_2) &= \langle \delta\psi_{\alpha_1}(\mathbf{x}_1, \tau_1) \delta\psi_{\alpha_2}(\mathbf{x}_2, \tau_2) \rangle = \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_m(\tau_1 - \tau_2)} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)} \\
&\frac{(-\int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} U(\mathbf{x})(n_0 e^{2i\phi} + \xi(\mathbf{x})) + \frac{1}{\hbar} \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x}) \Theta_m(\mathbf{x})) \delta_{\alpha_1\alpha_2}}{\beta \left[\left| -i\hbar\omega_m + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} U(\mathbf{x}) [2n_0 + s + \sigma(\mathbf{x})] - \frac{1}{\hbar} \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x}) K_m(\mathbf{x}) \right|^2 - \dots \right.} \\
&\dots \left. \dots - \left| \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} U(\mathbf{x})(n_0 e^{2i\phi} + \xi(\mathbf{x})) - \frac{1}{\hbar} \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x}) \Theta_m(\mathbf{x}) \right|^2 \right]} \\
&+ \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)} \\
&\left\{ \frac{\int d^D x (e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x})(n_0 e^{2i\phi} + \theta(\mathbf{x}))) \left| \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} U(\mathbf{x}) [2n_0 + s + \sigma(\mathbf{x})] - \frac{1}{\hbar} \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x}) K_0(\mathbf{x}) \right|^2 - \dots}{\left| \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} U(\mathbf{x}) [2n_0 + s + \sigma(\mathbf{x})] - \frac{1}{\hbar} \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x}) K_0(\mathbf{x}) \right|^2 - \dots} \dots \right. \\
&\dots \frac{-\int d^D x (e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x})(n_0 + \kappa(\mathbf{x}))) \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} U(\mathbf{x}) [2n_0 + s + \sigma(\mathbf{x})] - \frac{1}{\hbar} \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x}) K_0^*(\mathbf{x}) \right) \times \dots}{\dots - \left| \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} U(\mathbf{x})(n_0 e^{2i\phi} + \xi(\mathbf{x})) - \frac{1}{\hbar} \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x}) \Theta_0(\mathbf{x}) \right|^2} \dots} \\
&\dots \frac{\dots \times \left(\int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} U(\mathbf{x})(n_0 e^{2i\phi} + \xi(\mathbf{x})) - \frac{1}{\hbar} \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x}) \Theta_0(\mathbf{x}) \right)}{\dots} \\
&+ \frac{-\int d^D x (e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x})(n_0 + \kappa^*(\mathbf{x}))) \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} U(\mathbf{x}) [2n_0 + s + \sigma(\mathbf{x})] - \frac{1}{\hbar} \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x}) K_0(\mathbf{x}) \right) \times \dots}{\left| \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} U(\mathbf{x}) [2n_0 + s + \sigma(\mathbf{x})] - \frac{1}{\hbar} \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x}) K_0(\mathbf{x}) \right|^2 - \dots} \dots} \\
&\dots \frac{\dots \times \left(\int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} U(\mathbf{x})(n_0 e^{2i\phi} + \xi(\mathbf{x})) - \frac{1}{\hbar} \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x}) \Theta_0(\mathbf{x}) \right) + \dots}{\dots - \left| \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} U(\mathbf{x})(n_0 e^{2i\phi} + \xi(\mathbf{x})) - \frac{1}{\hbar} \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x}) \Theta_0(\mathbf{x}) \right|^2} \dots} \\
&\dots \left. \frac{\dots + \int d^D x (e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x})(n_0 e^{-2i\phi} + \theta^*(\mathbf{x}))) \left(\int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} U(\mathbf{x})(n_0 e^{2i\phi} + \xi(\mathbf{x})) - \frac{1}{\hbar} \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x}) \Theta_0(\mathbf{x}) \right)^2}{\dots} \right\}. \quad (4.81)
\end{aligned}$$

$\langle \delta\psi_{\alpha_1}^*(\mathbf{x}_1, \tau_1) \delta\psi_{\alpha_2}^*(\mathbf{x}_2, \tau_2) \rangle$ ist das komplex Konjugierte des Ausdrucks (4.81). Damit die herzuleitenden Molekularfeldgleichungen analytisch lösbar sind, müssen die Felder von \mathbf{x} unabhängig sein, oder Wechselwirkung bzw. Unordnungskorrelation müssen verschwinden. Das Ziel der Unabhängigkeit von \mathbf{x} kann durch nachfolgende Spezialisierung oder durch verschiedene Näherungen erreicht werden, die später behandelt werden.

4.4 Spezialisierung auf den Fall unkorrelierter R und lokaler U

Der interessanteste Spezialfall ist die Annahme eines unkorrelierter Zufallspotentials und lokaler Wechselwirkung, wie sie in (4.48) definiert wurden. Zur Herleitung der Molekularfeldgleichungen in diesem Spezialfall betrachte man dann die Korrelationen (4.80) und (4.81). Man sieht, dass man die dortigen Fouriertransformationen, bis auf die letzte, allesamt explizit durchführen kann. Die Gross-Pitaevskii-Gleichung lautet, in Erinnerung an (4.50),

$$[-\mu + g\sigma + gs + g\xi + gn_0] \sqrt{n_0} = \frac{R}{\hbar} [K_0 + \Theta_0] \sqrt{n_0}, \quad (4.82)$$

was man auch als

$$[-\mu + 2gn + g \langle \delta\psi \delta\psi \rangle - gn_0] \sqrt{n_0} = \frac{R}{\hbar} [K_0 + \Theta_0] \sqrt{n_0} \quad (4.83)$$

schreiben kann. Die Molekularfeldgleichungen sind, bereits unter Berücksichtigung der Zusammenhänge zwischen den Feldern, die folgenden:

Zunächst betrachte man die Teilchendichte (4.47). Die Definitionen der Molekularfelder (4.19)–(4.21) liefern unter

Annahme von Replikasymmetrie (4.35)–(4.37) sowie der Transformation (4.43) und der Notationsvorschrift (4.49) den Ausdruck für die Teilchendichte. Dabei ist zu beachten, dass wegen der Annahme von lokaler Wechselwirkung und unkorreliertem Potentials (4.48) die schon erwähnte Identität (4.51) feststeht, also dass $s = \sigma = n - n_0$ gilt. Die Gleichung lautet also

$$n - n_0 = \sigma = s = \kappa + \frac{1}{\hbar\beta} \lim_{\eta \searrow 0} \sum_{m=-\infty}^{\infty} K_m e^{i\omega_m \eta}. \quad (4.84)$$

Die ξ -Gleichung erhält man unter Verwendung von der Definitionen der Molekularfelder (4.22), (4.24) sowie Annahme von Replika-Symmetrie (4.38), (4.40), der Transformation (4.43) und unter Beachtung der Notationsvorschrift (4.49). Sie lautet:

$$\xi = \theta + \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \Theta_m. \quad (4.85)$$

Die Gleichung für ξ^* erhält man durch komplexe Konjugation. Direkt hiernach folgt die Gleichung für θ , durch Verwendung von der Definitionen des Molekularfelder (4.22), Repliksymmetrie (4.38), Notationsvorschrift (4.49) und der Korrelation (4.81):

$$\theta = \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left\{ \frac{R(n_0 e^{2i\phi} + \theta) \left| \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn - \frac{R}{\hbar} K_0 \right|^2 - R(n_0 + \kappa) \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn - \frac{R}{\hbar} K_0^* \right) \left(g(n_0 e^{2i\phi} + \xi) - \frac{R}{\hbar} \Theta_0 \right)}{\left[\left| \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn - \frac{R}{\hbar} K_0 \right|^2 - \left| g(n_0 e^{2i\phi} + \xi) - \frac{R}{\hbar} \Theta_0 \right|^2 \right]^2} + \frac{R(n_0 e^{-2i\phi} + \theta^*) \left(g(n_0 e^{2i\phi} + \xi) - \frac{R}{\hbar} \Theta_0 \right)^2 - R(n_0 + \kappa) \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn - \frac{R}{\hbar} K_0 \right) \left(g(n_0 e^{2i\phi} + \xi) - \frac{R}{\hbar} \Theta_0 \right)}{\left[\left| \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn - \frac{R}{\hbar} K_0 \right|^2 - \left| g(n_0 e^{2i\phi} + \xi) - \frac{R}{\hbar} \Theta_0 \right|^2 \right]^2} \right\}. \quad (4.86)$$

Auch hier folgt die Gleichung für θ^* durch komplexe Konjugation. Die Gleichung für κ lautet (mit Definition (4.19), Replika-Symmetrie (4.35), Notationsvorschrift (4.49) und Korrelation (4.80))

$$\kappa = \kappa^* = \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left\{ \frac{R(n_0 + \kappa) \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn - \frac{R}{\hbar} K_0^* \right)^2 - R(n_0 e^{2i\phi} + \theta) \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn - \frac{R}{\hbar} K_0^* \right) \left(g(n_0 e^{-2i\phi} + \xi^*) - \frac{R}{\hbar} \Theta_0^* \right)}{\left[\left| \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn - \frac{R}{\hbar} K_0 \right|^2 - \left| g(n_0 e^{2i\phi} + \xi) - \frac{R}{\hbar} \Theta_0 \right|^2 \right]^2} + \frac{-R(n_0 e^{-2i\phi} + \theta^*) \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn - \frac{R}{\hbar} K_0^* \right) \left(g(n_0 e^{2i\phi} + \xi) - \frac{R}{\hbar} \Theta_0 \right) + R(n_0 + \kappa) \left| g(n_0 e^{2i\phi} + \xi) - \frac{R}{\hbar} \Theta_0 \right|^2}{\left[\left| \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn - \frac{R}{\hbar} K_0 \right|^2 - \left| g(n_0 e^{2i\phi} + \xi) - \frac{R}{\hbar} \Theta_0 \right|^2 \right]^2} \right\}. \quad (4.87)$$

Schließlich fehlen noch die Gleichungen für die Felder K_m und Θ_m , welche sich durch dieselben Gleichungen wie κ und θ herleiten lassen. Es folgt

$$\frac{K_m}{\hbar} = \frac{K_m^*}{\hbar} = \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{i\hbar\omega_m + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn - \frac{R}{\hbar} K_m^*}{\left| -i\hbar\omega_m + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn - \frac{R}{\hbar} K_m \right|^2 - \left| g(n_0 e^{2i\phi} + \xi) - \frac{R}{\hbar} \Theta_m \right|^2}, \quad (4.88)$$

$$\frac{\Theta_m}{\hbar} = \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{-g(n_0 e^{2i\phi} + \xi) + \frac{R}{\hbar} \Theta_m}{\left| -i\hbar\omega_m + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn - \frac{R}{\hbar} K_m \right|^2 - \left| g(n_0 e^{2i\phi} + \xi) - \frac{R}{\hbar} \Theta_m \right|^2}. \quad (4.89)$$

Erneut folgt die Gleichung für Θ_m^* durch komplexe Konjugation. Bekanntlich kann $\phi = 0$ gewählt werden. Zur Vereinfachung wählt man dies nun. Ab hier gilt also stets

$$\phi = 0. \quad (4.90)$$

Dann folgt:

$$\begin{aligned} \Theta_m &= \Theta_{-m}^*, \\ \theta &= \theta^*. \end{aligned} \quad (4.91)$$

Mit Hilfe dieser zwei Gleichungen fällt auf, dass die Gleichungen (4.86) und (4.87) formgleich sind: Ersetzt man in einer der Gleichungen alle θ durch κ und umgekehrt, so erhält man die jeweils andere Gleichung. Dies ist ein Hinweis auf eine Lösung der Gleichungen mit

$$\theta = \kappa. \quad (4.92)$$

Mit anderen Worten: Dieser direkte Unordnungsbeitrag der normalen und anormalen Korrelationen ist gleich groß! Dies ist aber nur in Phasen gebrochener Symmetrie die korrekte Lösung. Falls die anormalen Korrelationen verschwinden, wie es in der Gasphase der Fall ist, ist

$$\theta = 0 \neq \kappa \quad (4.93)$$

die korrekte Lösung. Für $R = 0$ kann κ jedoch ebenfalls, aber unabhängig von θ , verschwinden. Falls $\theta = \kappa$ gilt, so lassen sich die Gleichungen zusammenfassen, womit im Zähler wie im Nenner eine binomische Formel steht. Man kann kürzen und erhält die einfache Gleichung

$$\kappa = \theta = \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{R(n_0 + \kappa)}{\left[\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn - \frac{R}{\hbar} K_0 + g(n_0 + \xi) - \frac{R}{\hbar} \Theta_0 \right]^2}. \quad (4.94)$$

Falls $\theta = 0$ gilt, was nur für $n_0 = 0$ der Fall sein kann, so folgt aber dieselbe Gleichung, wobei hier auch ξ und Θ_0 verschwinden, die hier im Nenner stehen. Die Lösung $\theta = \kappa$ vereinfacht die Gleichungen für n in (4.84) und ξ in (4.85) ebenfalls. Die Teilchendichtegleichung lautet dann wie gehabt

$$n - n_0 = \sigma = s = \kappa + \frac{1}{\hbar\beta} \lim_{\eta \searrow 0} \sum_{m=-\infty}^{\infty} K_m e^{i\omega_m \eta}. \quad (4.95)$$

Die ξ -Gleichung verändert sich allerdings zu

$$\xi = \kappa + \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \Theta_m. \quad (4.96)$$

4.5 Probleme der Hartree-Fock-Bogoliubov Näherung

Es sollen nun kurz die bekannten Probleme der Hartree-Fock-Bogoliubov Näherung diskutiert werden.

4.5.1 Fehlende Bandlückenfreiheit der Dispersion

Hugenholtz und Pines haben in ihrer Arbeit gezeigt, dass die Determinante der Matrix des Integralkerns verschwindet [41], und dies ein bandlückenfreies Anregungsspektrum liefert. Zur Garantie eines bandlückenfreien

Anregungsspektrums muss daher der Nenner von (4.88) für $m = 0$ und $\mathbf{k} = 0$ verschwinden, was äquivalent zum Verschwinden der Determinante des Integralkerns ist. Setzt man die Gross-Pitaevskii-Gleichung jedoch in diesen Nenner ein, so sieht man sofort, dass bei nichtverschwindendem Kondensat das Hugenholtz-Pines Theorem verletzt ist [41]. Das Spektrum ist also nicht bandlückenfrei, wie im Falle ohne Unordnung bereits Girardeau und Arnowitt zeigten [42]. Grund ist nach Shi und Griffin [43] bzw. Proukakis, Burnett und Stoof [44] eine nichtkonsistente Mitnahme bzw. Überzählung bestimmter Diagramme. Möchte man ein bandlückenfreies Spektrum haben, so kann man $g\xi - \frac{R}{\hbar}\Theta_0 = 0$ fordern, was im Falle ohne Unordnung der so genannten Popov-Näherung entspricht. Man sollte aber darauf hinweisen, dass sie im Allgemeinen nicht für $T = 0$ anwendbar ist, sondern nur für $T \approx T_c$. Mit Unordnung trifft dies demnach ebenfalls zu. Popov selbst hat eine Gültigkeit für $T = 0$ auch nie so vorgeschlagen, wie ein kurzer Blick in seine Arbeiten bestätigt [45–48]. Falls man Größen berechnet, die die anormalen Korrelationen nicht explizit enthalten, so sieht man in niedrigster Ordnung einer Entwicklung nach R oder g keine Effekte dieser Näherung, da sie bei diesen Größen erst in höheren Ordnungen relevant wird. Das bedeutet, dass die Popov-Näherung, bzw. eine Näherung, die derselben Philosophie der Vernachlässigung anormaler Korrelationen folgt, in niedrigster Ordnung stets vertrauenswürdig ist.

Die T-Matrix-Renormierungsmethode nach Stoof und Bijlsma [30] benutzt allerdings eine andere Rechtfertigung des Weglassens der anormalen Korrelationen: Sie sagt, dass die anormalen Terme bezüglich der Wechselwirkung bereits bei der Berechnung der Kopplungskonstanten berücksichtigt wurden, die in 0. Ordnung der in der zitierten Arbeit verwendeten Entwicklung gleich dem hier verwendeten g ist. Folgt man dieser Begründung, so ist es notwendig, die anormalen Terme immer zu vernachlässigen, und g durch die T-Matrix zu ersetzen. Es handelt sich also nicht um eine Näherung.

Eine analoge "T-Matrix"-Beschreibung für die Unordnungsstärke R existiert in der Literatur anscheinend nicht. Es gibt aber einige Überlegungen von P. Navez zu diesem Thema [49], die im Grenzfall eines räumlich unkorrelierten Unordnungspotentials dasselbe Ergebnis liefern wie dimensionale Regularisierung, die in Anhang D erklärt wird. Navez benutzt in seiner Arbeit einen Langevin-Ansatz, um aus der Gross-Pitaevskii-Gleichung mit Unordnung Gleichungen für die Felder herzuleiten. Dabei geht er von einem Lorentz-korrelierten Zufallspotential aus. Für kleine Korrelationslängen ergeben sich in seiner Arbeit zunächst Probleme, die er durch eine Renormierung der Unordnungsstärke behebt. Folgt man der Vorgehensweise bei der Renormierung, die für die Renormierung der Wechselwirkung verwendet wird, so ist es plausibel anzunehmen, dass in der Gross-Pitaevskii-Gleichung die anormalen Korrelationen weggelassen werden müssen, was Navez aber nicht macht. Das Kriterium, welche Korrelationen weggelassen werden müssen, ist hierbei durch die Forderung nach Bandlückenfreiheit der Dispersion gegeben.

4.5.2 Lösungsvorschläge

Dieses Problem lässt eine Methode wünschenswert erscheinen, die diese beseitigt.

Eine mögliche Theorie wären die Ideen Yukalovs und Kleinerts [50], welche auf der Einführung eines zusätzlichen chemischen Potentials μ_0 für das Kondensat beruhen. Die Gross-Pitaevskii-Gleichung wird durch Extremalisierung des effektiven Potentials nach der Kondensatwellenfunktion festgelegt und bestimmt so dieses neue chemische Potential. Das physikalische chemische Potential selbst wird durch das Hugenholtz-Pines Theorem festgelegt. Genaue Betrachtung der Theorie des wechselwirkenden Bose-Gases ohne Unordnung offenbart allerdings diverse physikalische Probleme unterhalb der kritischen Temperatur. Insbesondere bei lokaler Wechselwirkung U und zu starker Wechselwirkungsstärke g erlaubt die Theorie keinerlei konsistente Lösung mehr, hat aber diesen Anspruch. Dies und die Einführung zweier verschiedener chemischer Potentiale für Kondensat und den Rest des Systems weckt Zweifel an der generellen Richtigkeit der Theorie.

Ein anderer Ansatz wäre der Versuch, eine Molekularfeldtheorie mittels Hubbard-Stratonovich-Transformation herzuleiten. Dies wurde im Rahmen der Diplomarbeit versucht, führte aber ebenfalls nicht zu befriedigenden Lösungen. Insbesondere trat eine Infrarot-Divergenz bei einem der Terme auf. Außerdem konnten Konstanten, die vor den einzelnen Hubbard-Stratonovich-Feldern bei der Herleitung auftauchen, nicht durch die Theorie selbst bestimmt werden, sondern es mussten Zusatzinformationen hineingesteckt werden. Die entstehenden Gleichungen lassen sich, sofern man bestimmte Konstanten wählt, aus denen in diesem Kapitel ad hoc herleiten, wenn man stets $(n_0 + \xi)$ durch $-(n_0 + \xi)$ ersetzt, sofern diese Terme in dieser Kombination explizit auftauchen (also nur auf den rechten Seiten der Gleichungen, und in der Gross-Pitaevskii-Gleichung).

Es konnte keine konsistente Theorie gefunden werden, die dieses Problem löst. Daher muss bei der Lösung der Gleichungen stets beachtet werden, dass bei exakter Behandlung unphysikalische Effekte auftauchen. Die Gleichungen müssen also ggf. mittels physikalischer Begründungen konsistent durch andere ersetzt werden, wie es die so genannte Popov-Theorie macht.

Kapitel 5

Näherungsweise Lösung der Hartree-Fock-Bogoliubov-Gleichungen

In diesem Kapitel sollen nun die Vorhersagen der in Kapitel 4 hergeleiteten Hartree-Fock-Bogoliubov-Theorie näher untersucht werden. Hierfür wird als erstes diskutiert, wie die Gleichungen bei allgemeinem Wechselwirkungspotential und allgemeiner Unordnungskorrelation behandelt werden können. Danach wird zuerst das großkanonische Potential berechnet. Darauf folgend wird untersucht, ob der unordnungsfreie Limes die bekannte Popov-Theorie ergibt. Anschließend soll die Theorie für die Unordnung untersucht werden. Für schwache Unordnung stellt sich heraus, dass das bekannte Ergebnis von Huang und Meng für die Kondensatdichte reproduziert werden kann. Dieses Ergebnis kann für starke Unordnung erweitert werden, sofern man sehr schwache Wechselwirkung annimmt. Auch kann eine Formel zur Berechnung der superfluiden Dichte hergeleitet werden. Auch hier wird für schwache Unordnung das Huang-Meng-Ergebnis für die superfluide Dichte reproduziert. Eine Erweiterung auch dieses Ergebnisses für starke Unordnung ist möglich. Es tauchen aber sowohl bei der Kondensatdichte als auch bei der superfluiden Dichte Probleme auf. Insbesondere sagen die Gleichungen aus, dass die Dispersion der Quasiteilchen nicht bandlückenfrei ist, was sie aber nach allgemeinen Überlegungen sein müsste. Diese Probleme werden ausführlich diskutiert, wobei zwei konkurrierende Ansätze zu deren Behandlung vorgestellt werden.

5.1 R nichtlokal ortsabhängig

Man möchte bei lokalem Wechselwirkungspotential versuchen, möglichst für beliebige Unordnungskorrelation Aussagen zu machen. Möchte man die exakten Abhängigkeiten der Korrelationen (4.80) und (4.81) von einer allgemeinen (nichtlokalen) Unordnungskorrelation betrachten, so ist dies analytisch nur sehr schwer möglich, da sie Integrale über die unbekanntes Felder beinhalten. Einen Ausweg bietet eine Entwicklung der Gleichungen nach kleiner Unordnungskorrelation und Wechselwirkung. Man bekommt heraus, dass dann effektiv alle Terme vernachlässigt werden, welche explizit ortsabhängig sind, aber die nicht explizit ortsabhängigen Terme bleiben erhalten. Die zu betrachtenden Felder sind die Molekularfelder (4.19)–(4.25) unter Beachtung der Korrelationen (4.80) und (4.81), wenn man berücksichtigt, dass man die Teilchendichte berechnen möchte. Man macht nun eine Vereinfachung für das Wechselwirkungspotential mittels der Pseudopotentialmethode [29, Kapitel 10]. Explizit setzt man

$$R(\mathbf{x}) = R(-\mathbf{x}) \quad (5.1)$$

beliebig, aber

$$U(\mathbf{x}) = g\delta(\mathbf{x}). \quad (5.2)$$

Betrachtet man nun die einzelnen Teilwirkungen (4.16), (4.26) und (4.27) unter diesen Voraussetzungen und setzt U ein, so fällt auf, dass die Felder ξ , σ und s grundsätzlich lokal in der Wirkung auftauchen. Das bedeutet insbesondere, dass die Fouriertransformationen in den Korrelationen (4.80) und (4.81), die diese Felder enthalten, sofort durchführbar sind. Es bleibt das Problem der Ortsabhängigkeit der K_m , Θ_m sowie von κ und θ . Hier wird die Näherung verwendet, dass R und g klein sind. Man kann nun einen künstlichen Kleinheitsparameter γ einführen, der die Ordnung der Entwicklung in den Korrelationen angibt. Damit sind die Korrelationen alle von der Größenordnung γ :

$$\begin{aligned} \kappa, \theta &= O(\gamma) \\ K_m, K_m^*, \Theta_m, \Theta_m^* &= O(\gamma). \end{aligned} \quad (5.3)$$

Die Gross-Pitaevskii-Gleichung wird ebenfalls bis zur ersten Ordnung in γ entwickelt, aber beim Einsetzen der Gleichung muss man den Term proportional γ vernachlässigen, da er nur einen Beitrag in γ^2 liefert. Damit folgt die Gleichung für die Teilchendichte mit Hilfe der normalen Korrelation (4.80):

$$\begin{aligned} s = \sigma = n - n_0 &= \gamma \lim_{\eta \searrow 0} \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{i\omega_m \eta} \frac{\left(i\hbar\omega_m + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn_0 \right) \delta_{\alpha_1 \alpha_2}}{\beta \left[\hbar^2 \omega_m^2 + \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn_0 \right)^2 - |gn_0|^2 \right]} \\ &+ \gamma \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{R(\mathbf{k})n_0}{\left[\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 3gn_0 \right]^2} + O(\gamma^2). \end{aligned} \quad (5.4)$$

Die Gross-Pitaevskii-Gleichung ist dann nach (4.45) offenbar

$$[-\mu + gn_0 + s + \sigma + \xi] \sqrt{n_0} = \gamma \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{R(\mathbf{k})n_0}{\left[\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 3gn_0 \right]} + O(\gamma^2). \quad (5.5)$$

Dann folgt die Gleichung für ξ aus der anormalen Korrelation (4.81)

$$\begin{aligned} \xi = \xi^* &= \gamma \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{-gn_0}{\beta \left[\hbar^2 \omega_m^2 + \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn_0 \right)^2 - |gn_0|^2 \right]} \\ &+ \gamma \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{R(\mathbf{k})n_0}{\left[\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 3gn_0 \right]^2} + O(\gamma^2). \end{aligned} \quad (5.6)$$

Diese Gleichungen geben dann eine Integralformel an, mit der man für jede beliebige Unordnungsverteilung die Entleerung des Grundzustandes berechnen kann. Offensichtlich gibt die Formel die Entleerung nur in niedrigster Ordnung in den Fluktuationen, also für kleine Wechselwirkung und Unordnung, an. Wie in Abschnitt 5.5 hergeleitet wird, reproduziert man für ein unkorreliertes Zufallspotential, d.h. $R(\mathbf{k}) \equiv R$, auf diese Weise das Huang-Meng-Ergebnis für die Entleerung des Grundzustandes [18].

5.2 Schnell abfallende R und U

Eine weitere Möglichkeit, die Molekularfeldtheorie für beinahe beliebige Wechselwirkung und Unordnung auch analytisch berechnen zu können, liefert die Annahme räumlich schnell abfallender, aber nicht lokaler, Wechselwirkung und Unordnung: Sie sollen räumlich viel schneller abfallen, als die Felder ξ , σ , Θ_m , K_m , θ und κ . Ein

Beispiel für diesen Fall liefert bereits Abschnitt 4.4, also der Fall lokaler R und U . Die in den Korrelationen (4.80)–(4.81) auftauchenden Fouriertransformationen können dann sehr gut durch eine Fouriertransformation der Wechselwirkung bzw. der Unordnungskorrelation mal einer Konstante genähert werden. Diese Konstante ist das jeweilige Feld in der Transformation an der Stelle $\mathbf{x} = 0$, wie es in Gleichung (4.49) definiert wurde. Beispielsweise ist dann

$$\begin{aligned} \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} U(\mathbf{x}) [2n_0 + s + \sigma(\mathbf{x})] &\approx \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} U(\mathbf{x}) [2n_0 + s + \sigma(\mathbf{x} = \mathbf{0})] \\ &= U(\mathbf{k}) [2n_0 + s + \sigma(\mathbf{x} = \mathbf{0})]. \end{aligned} \quad (5.7)$$

Die Herleitung der dann entstehenden Gleichungen funktioniert völlig äquivalent zu Abschnitt 4.4, man muss nur g durch $U(\mathbf{k})$ und R durch $R(\mathbf{k})$ ersetzen. Die sich ergebenden Molekularfeldgleichungen sind die Gleichungen (4.88), (4.89) und (4.94)–(4.96), die für lokale Wechselwirkung und unkorreliertes Zufallspotential hergeleitet wurden, aber mit den Substitutionen

$$\begin{aligned} g &\rightarrow U(\mathbf{k}), \\ R &\rightarrow R(\mathbf{k}). \end{aligned} \quad (5.8)$$

Man beachte, dass dann auch für diesen Fall gilt, dass

$$s = \sigma = n - n_0. \quad (5.9)$$

Falls man sich in einer Phase gebrochener Symmetrie befindet, so gilt auch

$$\kappa = \theta. \quad (5.10)$$

Ansonsten ist $\theta = 0$. Die Gross-Pitaevskii-Gleichung erhält man durch die Substitution

$$\begin{aligned} g &\rightarrow U(\mathbf{k} = \mathbf{0}), \\ R &\rightarrow R(\mathbf{k} = \mathbf{0}) \end{aligned} \quad (5.11)$$

in der Gross-Pitaevskii-Gleichung für lokale Wechselwirkung und unkorreliertes Zufallspotential (4.82), wie man durch Vergleich mit (4.45) sieht. Sie lautet demnach unter Verwendung des Zusammenhangs zwischen Teilendichte und s bzw. σ in (5.9):

$$[-\mu + 2U(\mathbf{k} = \mathbf{0})n + U(\mathbf{k} = \mathbf{0})\xi - U(\mathbf{k} = \mathbf{0})n_0] \sqrt{n_0} = \frac{R(\mathbf{k} = \mathbf{0})}{\hbar} [K_0 + \Theta_0] \sqrt{n_0}. \quad (5.12)$$

Ein zunächst unauffälliges Problem ergibt sich aber bei dieser Substitution: Integrale, die im Falle eines räumlich unkorrelierten Zufallspotentials UV-divergent sind (in der Gross-Pitaevskii-Gleichung), sind nun nicht mehr UV-divergent. Integriert man das entstehende Integral auf der rechten Seite in der Gross-Pitaevskii-Gleichung (5.12) naiv aus, so kann man erkennen, dass ein Limes, bei dem man von allgemeinem $R(\mathbf{k})$ mit endlicher Korrelationslänge ξ zu einer räumlich unkorrelierten Unordnung mit $\xi = 0$ kommt, einen anderen Wert liefert, als wenn man sofort unkorrelierte Unordnung genommen hätte, und die Divergenzen mittels dimensionaler Regularisierung behandelt hätte. Der Grund ist eine nicht durchgeführte Renormierung der nackten Korrelation $R(\mathbf{k})$, die durchgeführt werden müsste, um ein korrektes Ergebnis zu liefern. Eine solche Renormierungsvorschrift ist aber anscheinend in der Literatur nicht bekannt, auch wenn es dazu Überlegungen von P. Navez gibt [49]. Es müsste dasselbe wie bei dimensionaler Regularisierung (siehe D.5) als Ergebnis herauskommen, wenn man die Erfahrungen übertragen kann, die man für die Wechselwirkung gemacht hat. Dimensionale Regularisierung wird in der

Arbeit von Andersen [5] durchgängig verwendet. Wenn renormiert werden muss, wird daher im Zweifelsfall Gleichung (D.5) verwendet.

Auf Grund der fehlenden Renormierungsvorschrift wird die Verwendung eines allgemeinen $R(\mathbf{k})$ und $U(\mathbf{k})$ rechentechisch nicht weiter verfolgt, aber später dazu benutzt, um Schreibweisen zu vereinfachen und anzudeuten, dass eine größere Allgemeinheit im Prinzip erzielt werden könnte.

5.3 Effektives Potential

In diesem Abschnitt soll das effektive Potential berechnet werden. Dies geschieht zunächst ohne jede Näherung oder Spezialisierung, d.h. so allgemein wie möglich. Um Schreibweisen zu vereinfachen, werden später die Überlegungen aus Abschnitt 5.2 verwendet.

Man geht von der Replika-Wirkung (4.9) mit den Teilen (4.16), (4.26) und (4.27) aus. Das großkanonische Potential $\Omega = -\frac{1}{\beta} \ln \overline{\mathcal{Z}}$ berechnet sich daraus mittels

$$V_{\text{eff}} = - \lim_{N \rightarrow 0} \frac{1}{N\beta} \ln \overline{\mathcal{Z}^N}, \quad (5.13)$$

wobei Ω das effektive Potential, ausgewertet am Minimum ist, also

$$\Omega = V_{\text{eff}} \Big|_{\text{Min}}. \quad (5.14)$$

Das effektive Potential ist hierbei bezüglich aller Felder und bezüglich $\sqrt{n_0}$ zu extremalisieren. Die Freie Energie ist das großkanonische Potential mit hinzuaddiertem $\mu(n)nV$, also

$$F = (V_{\text{eff}} + \mu n V) \Big|_{\text{Min}}, \quad (5.15)$$

welche für festes n nun auch bezüglich μ zu minimalisieren ist. Demnach ist es interessant, das großkanonische Potential zu berechnen. Man erhält zunächst unter Beachtung von Replika-Symmetrie (4.33)–(4.41) sowie der Fouriertransformation (4.43) und Erinnerung an das effektive Potential (4.30) unter Berücksichtigung der Teilwirkung (4.28) die Gleichung

$$\begin{aligned} V_{\text{eff}} = & \int d^D x \int d^D x' \left\{ -\mu n_0 \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') + U(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \left[\frac{1}{2} n_0^2 - \frac{1}{2} \xi^2(\mathbf{x} - \mathbf{x}') - \frac{1}{2} s^2 - \frac{1}{2} \sigma^2(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \right] \right. \\ & + R(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \left[\frac{1}{\hbar} K_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \kappa(\mathbf{x} - \mathbf{x}') + \frac{1}{2\beta\hbar^2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} K_m^2(\mathbf{x} - \mathbf{x}') e^{i\omega_m \eta} \right. \\ & \left. \left. \frac{1}{\hbar} \Theta_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \theta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') + \frac{1}{2\beta\hbar^2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \Theta_m^2(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \right] \right\} \\ & - \lim_{N \rightarrow 0} \frac{1}{N\beta} \ln \left\{ \prod_{\alpha=1}^N \oint \mathcal{D}\delta\psi_{\alpha}^* \oint \mathcal{D}\delta\psi_{\alpha} \right\} e^{-\tilde{\mathcal{A}}[\delta\psi^* \delta\psi]/\hbar}. \end{aligned} \quad (5.16)$$

Das η berücksichtigt hierbei, dass im effektiven Potential die Feldoperatoren in Normalordnung auftreten müssen. Hierbei wurde davon Gebrauch gemacht, dass für alle Felder Φ

$$\Phi(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \Phi(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) \quad (5.17)$$

gilt. Das effektive Potential schreibt man nun als

$$V_{\text{eff}} = V_{\text{eff}}^{(0)} + V_{\text{eff}}^{(2)}, \quad (5.18)$$

wobei $V_{\text{eff}}^{(0)}$ nur die Terme enthält, die nicht von den Fluktuationen herrühren, und $V_{\text{eff}}^{(2)}$ nur die Fluktuationsbeiträge enthält. Es ist also

$$V_{\text{eff}}^{(2)} = \lim_{N \rightarrow 0} \frac{1}{N} V_{\text{eff}}^{(N,2)}, \quad (5.19)$$

und für $V_{\text{eff}}^{(N,2)}$ gilt

$$V_{\text{eff}}^{(N,2)} = -\frac{1}{\beta} \ln \left\{ \left[\prod_{\alpha=1}^N \oint \mathcal{D}\delta\psi_{\alpha}^* \oint \mathcal{D}\delta\psi_{\alpha} \right] e^{-\tilde{\mathcal{A}}[\delta\psi^* \delta\psi]/\hbar} \right\}. \quad (5.20)$$

Schreibt man nun die Wirkung $\tilde{\mathcal{A}}[\delta\psi^* \delta\psi]$ als Matrixmultiplikation, wie in Gleichung (4.56), so kann man sofort berechnen, dass gilt

$$V_{\text{eff}}^{(N,2)} = \frac{1}{2\beta} \text{Tr} \ln G^{-1}. \quad (5.21)$$

In der $2N \times 2N$ Matrix G^{-1} steht dabei in jedem Eintrag (α, α') die 2×2 -Matrix $G_{\alpha\alpha'}^{-1}$, wobei $1 \leq \alpha, \alpha' \leq N$ gilt. Außerdem ist zu beachten, dass hierbei die Normalordnung der Operatoren nicht berücksichtigt wurde, weshalb erneut ein Term $e^{i\omega_m \eta}$ eingeführt wird. Nach einer Fourier-Matsubara-Transformation des Integralkerns G^{-1} bekommt man so

$$V_{\text{eff}}^{(N,2)} = \frac{V}{2\beta} \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \ln [\text{Det} G^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m)] e^{i\omega_m \eta}. \quad (5.22)$$

Die Matrix $G_{\alpha\alpha'}^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m)$ hat die bekannte Struktur (4.62) mit den Abkürzungen (4.64)–(4.66) sowie (4.73). Diese Determinante zu berechnen ist hinreichend schwierig, sodass hier ein kleiner Einschub folgen müsste, der in Anhang F ausgelagert ist. Das Ergebnis der Berechnung lautet

$$\text{Det} G^{-1} = (aa^* - dd^*)^{N-1} [(a + Nb)((a^*) + Nb^*) - (d + Nc)(d^* + Nc^*)]. \quad (5.23)$$

Damit folgt für kleine N

$$V_{\text{eff}}^{(N,2)} = \frac{V}{2\beta} \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{i\omega_m \eta} \left\{ N \ln(aa^* - dd^*) + N \frac{ba^* + ab^* - cd^* - c^*d}{aa^* - dd^*} + O(N^2) \right\}. \quad (5.24)$$

Im Replika-Limes $N \rightarrow 0$ folgt dann unter Beachtung der Definition (5.19):

$$V_{\text{eff}}^{(2)} = \frac{V}{2\beta} \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left\{ \ln(aa^* - dd^*) e^{i\omega_m \eta} + \frac{ba^* + ab^* - cd^* - c^*d}{aa^* - dd^*} \right\}. \quad (5.25)$$

In den Termen, die proportional zu b, b^*, c, c^* sind, ist die Zeitordnung auf Grund von deren expliziter Form (4.64) und (4.65) nicht notwendig. Man benutzt nun die Überlegungen in Abschnitt 5.2, um die Schreibweise deutlich übersichtlicher zu gestalten. Die spätere Zurücknahme der verwendeten Abkürzungen ist zudem problemlos durch passende Substitution möglich.

Damit gilt mit den Bezeichnungen aus (4.49) nach (5.16)

$$V_{\text{eff}}^{(0)} = V \left\{ -\mu n_0 + U(\mathbf{k} = \mathbf{0}) \left[\frac{1}{2} n_0^2 - \frac{1}{2} \xi^2 - \frac{1}{2} s^2 - \frac{1}{2} \sigma^2 \right] \right. \\ \left. + R(\mathbf{k} = \mathbf{0}) \left[\frac{1}{\hbar} K_0 \kappa + \frac{1}{2\beta \hbar^2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} K_m^2 e^{i\omega_m \eta} + \frac{1}{\hbar} \Theta_0 \theta + \frac{1}{2\beta \hbar^2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \Theta_m^2 \right] \right\}. \quad (5.26)$$

Setzt man nun die Abkürzungen (4.64)–(4.66) sowie (4.73) bei Verwendung des Zusammenhangs zwischen n , s und σ in (5.9) wieder ein, so folgt aus (5.25)

$$V_{\text{eff}}^{(2)} = V \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left\{ \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\beta} \ln \left[\left| -i\hbar\omega_m + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2U(\mathbf{k})n - \frac{1}{\hbar}R(\mathbf{k})K_m \right|^2 \right. \right. \\ \left. \left. - \left| U(\mathbf{k})(n_0 + \xi) - \frac{1}{\hbar}R(\mathbf{k})\Theta_m \right|^2 \right] e^{i\omega_m \eta} \right. \\ \left. - \frac{R(\mathbf{k})(n_0 + \kappa) \left[\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2U(\mathbf{k})n - \frac{1}{\hbar}R(\mathbf{k})K_0 \right] - R(\mathbf{k})(n_0 + \theta) \left[U(\mathbf{k})(n_0 + \xi) - \frac{1}{\hbar}R(\mathbf{k})\Theta_0 \right]}{\left| \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2U(\mathbf{k})n - \frac{1}{\hbar}R(\mathbf{k})K_0 \right|^2 - \left| U(\mathbf{k})(n_0 + \xi) - \frac{1}{\hbar}R(\mathbf{k})\Theta_0 \right|^2} \right\}. \quad (5.27)$$

Insgesamt erhält man also für das effektive Potential

$$V_{\text{eff}} = V_{\text{eff}}^{(0)} + V_{\text{eff}}^{(2)} \\ = V \left\{ -\mu n_0 + U(\mathbf{k} = \mathbf{0}) \left[\frac{1}{2}n_0^2 - \frac{1}{2}\xi^2 - \frac{1}{2}s^2 - \frac{1}{2}\sigma^2 \right] \right. \\ \left. + R(\mathbf{k} = \mathbf{0}) \left[\frac{1}{\hbar}K_0\kappa + \frac{1}{2\beta\hbar^2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} K_m^2 e^{i\omega_m \eta} + \frac{1}{\hbar}\Theta_0\theta + \frac{1}{2\beta\hbar^2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \Theta_m^2 \right] \right\} \\ + V \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left\{ \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\beta} \ln \left[\left| -i\hbar\omega_m + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2U(\mathbf{k})n - \frac{1}{\hbar}R(\mathbf{k})K_m \right|^2 \right. \right. \\ \left. \left. - \left| U(\mathbf{k})(n_0 + \xi) - \frac{1}{\hbar}R(\mathbf{k})\Theta_m \right|^2 \right] e^{i\omega_m \eta} \right. \\ \left. - \frac{R(\mathbf{k})(n_0 + \kappa) \left[\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2U(\mathbf{k})n - \frac{1}{\hbar}R(\mathbf{k})K_0 \right] - R(\mathbf{k})(n_0 + \theta) \left[U(\mathbf{k})(n_0 + \xi) - \frac{1}{\hbar}R(\mathbf{k})\Theta_0 \right]}{\left| \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2U(\mathbf{k})n - \frac{1}{\hbar}R(\mathbf{k})K_0 \right|^2 - \left| U(\mathbf{k})(n_0 + \xi) - \frac{1}{\hbar}R(\mathbf{k})\Theta_0 \right|^2} \right\}. \quad (5.28)$$

Nach Ausführung der Summen über die m kann es in diesem Term allerdings bei der \mathbf{k} -Integration zu Divergenzen im Ultraviolett kommen. Diese müssen jedoch nicht ernst genommen werden, da sie auf einem zu einfachen Modell der Wechselwirkung und Unordnung beruhen. In physikalischen Systemen fällt die Wechselwirkung bzw. Unordnung für große \mathbf{k} stets auf 0 ab, was auf Grund der Annahme, dass man eine lokale Wechselwirkung und ein unkorreliertes Zufallspotential hat, hier nicht der Fall ist. Statt dessen sind derlei divergente Terme zu renormieren oder zu regularisieren. Die praktische Vorgehensweise der Regularisierung wird von Andersen angedeutet [5]. Eine Fassung davon findet sich in Anhang D.

Ein prinzipielles Problem besteht zusätzlich: Um dieses Potential am Minimum berechnen zu können, müssen die K_m und Θ_m als Lösung der aus der Minimalisierungsbedingung folgenden Feldgleichungen explizit bekannt sein. Somit wird die allgemeine Berechnung hier abgeschlossen, um einfachere Spezialfälle zu betrachten. Es stellte sich allerdings heraus, dass eine analytische Berechnung des gesamten effektiven Potentials nicht möglich war, da die K_m und Θ_m nicht analytisch bestimmt werden konnten.

5.4 Popov-Theorie ohne Unordnung

Es soll nun zunächst untersucht werden, ob die Popov-Theorie reproduzierbar ist. Die Popov-Theorie, wie sie von Popov hergeleitet wurde, ist eine Theorie schwacher Wechselwirkung [45–48]. Eine andere Formulierung der

Theorie findet sich z.B. in Andersen [5]. Hierbei werden anormale Korrelationen vernachlässigt, da sie von höherer Ordnung in der Wechselwirkung sind als andere mitgenommene Terme. Eine andere Rechtfertigung der Theorie besteht darin, dass sie ein bandlückenfreies Anregungsspektrum garantiert. Man geht in der Popov-Theorie von lokaler Wechselwirkung aus. Die allgemeinen Gleichungen ohne Unordnung lassen sich aus den Gleichungen für n in (4.95) und ξ in (4.96) sowie der Gross-Pitaevskii-Gleichung (4.82) durch Setzen von $R = 0$ herleiten. Die entstehenden Gleichungen sind die für die Teilchendichte,

$$n = n_0 + \lim_{\eta \searrow 0} \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{i\omega_m \eta} \frac{i\hbar\omega_m + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn}{\beta[\hbar^2\omega_m^2 + (\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn)^2 - |g(n_0 + \xi)|^2]}, \quad (5.29)$$

die für das ξ -Feld,

$$\xi = \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{-g(n_0 + \xi)}{\beta[\hbar^2\omega_m^2 + (\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn)^2 - |g(n_0 + \xi)|^2]}, \quad (5.30)$$

und die Gross-Pitaevskii-Gleichung,

$$[-\mu + 2gn + g\xi - gn_0] \sqrt{n_0} = 0. \quad (5.31)$$

Dieselben Gleichungen lassen sich herleiten, wenn man das effektive Potential (5.28) für $R = 0$ minimiert. In der Popov-Theorie geht man von schwacher Wechselwirkung g im Temperaturbereich $T \lesssim T_c$ oder im Bereich $T > T_c$ aus, wo sich die Popov-Theorie auf die Hartree-Fock-Theorie reduziert. Damit können die anormalen Korrelationen vernachlässigt werden. Der entscheidende Ansatz der Popov-Näherung lautet dann für das ξ -Feld

$$\xi = 0. \quad (5.32)$$

Dies widerspricht im Fall $gn_0 \neq 0$ offensichtlich (5.30), führt aber dazu, dass das Spektrum keine Bandlücke besitzt, wie in (5.46) gezeigt wird. Setzt man im effektiven Potential (5.28) sofort $\xi = 0$ und minimiert dann, so bekommt man Gleichung (5.29) mit $\xi = 0$, aber auch die Gleichung

$$\left[-\mu + 2gn - gn_0 - \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{-gn_0}{\beta[\hbar^2\omega_m^2 + (\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn)^2 - |gn_0|^2]} \right] \sqrt{n_0} = 0. \quad (5.33)$$

Aus $\xi = 0$ nach Extremalisierung des Potentials folgen direkt die Gleichungen für die Teilchendichte,

$$n = n_0 + \lim_{\eta \searrow 0} \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{i\omega_m \eta} \frac{i\hbar\omega_m + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn}{\beta[\hbar^2\omega_m^2 + (\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn)^2 - g^2 n_0^2]}, \quad (5.34)$$

und die genäherte Gross-Pitaevskii-Gleichung

$$[-\mu + 2gn - gn_0] \sqrt{n_0} = 0. \quad (5.35)$$

Letztere Gleichung entspricht nicht (5.33), sodass zu beachten ist, dass Extremalisierung des effektiven Potentials und Vernachlässigen der anormalen Korrelationen nicht miteinander vertauschen. Im Limes schwacher Wechselwirkung liefert die T-Matrix Theorie, dass

$$g = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{M}, \quad (5.36)$$

wobei a_s die s-Wellen-Streulänge ist [30]. Mittels Poisson-Formel (A.7) und Residuensatz erhält man für die Teilchendichte

$$n = n_0 + \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left[\frac{\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn}{\sqrt{(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn)^2 - g^2 n_0^2}} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta\sqrt{(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn)^2 - g^2 n_0^2}} - 1}} \right) - \frac{1}{2} \right]. \quad (5.37)$$

Man kann nun die bekannte Substitution

$$\epsilon = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} \quad (5.38)$$

für die Energie durchführen. In $D = 3$ Dimensionen erhält man dann

$$n = n_0 + \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty d\epsilon \sqrt{\epsilon} \left[\frac{\epsilon - \mu + 2gn}{\sqrt{(\epsilon - \mu + 2gn)^2 - g^2 n_0^2}} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta\sqrt{(\epsilon - \mu + 2gn)^2 - g^2 n_0^2}} - 1} \right) - \frac{1}{2} \right]. \quad (5.39)$$

Man kann nun die Fälle $T > T_c$ und $T < T_c$ unterscheiden. Im Falle $T > T_c$ erhält man für die Teilchendichtegleichung bei verschwindender Kondensatdichte

$$n = \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty d\epsilon \frac{\sqrt{\epsilon}}{e^{\beta(\epsilon - \mu + 2gn)} - 1}. \quad (5.40)$$

Den Nenner entwickelt man nun in eine unendliche Reihe nach $e^{-\beta(\epsilon - \mu + 2gn)}$,

$$n = \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty d\epsilon \sqrt{\epsilon} \sum_{k=1}^\infty e^{-\beta k(\epsilon - \mu + 2gn)}. \quad (5.41)$$

Offenbar handelt es sich bei dem Integral um die um eine Konstante variierte Definition der Γ -Funktion $\Gamma(3/2)$. Damit folgt

$$n = \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{3/2} \sum_{k=1}^\infty \frac{e^{\beta k(\mu - 2gn)}}{n^{3/2}}. \quad (5.42)$$

Im Falle $T > T_c$ erhält man also das bekannte Hartree-Fock-Ergebnis,

$$n = \frac{1}{\lambda^3} \zeta_{3/2} \left(e^{\beta(\mu - 2gn)} \right), \quad (5.43)$$

wobei λ die thermische de-Broglie Wellenlänge ist,

$$\lambda = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{Mk_B T}}. \quad (5.44)$$

Im Falle $T < T_c$ erhält man nach Ersetzen des chemischen Potentials mittels der Gross-Pitaevskii-Gleichung (5.35) das Ergebnis

$$n = n_0 + \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \sqrt{a_s n_0}^3 + \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty d\epsilon \left[\frac{\epsilon + gn_0}{\sqrt{\epsilon + 2gn_0}} \frac{1}{e^{\beta\sqrt{\epsilon^2 + 2gn_0\epsilon}} - 1} \right]. \quad (5.45)$$

Die Dispersionsrelation lautet

$$E(\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} + 2gn_0 \right)}. \quad (5.46)$$

Sie ist demnach bandlückenfrei und von der Form, die das Goldstone-Theorem verlangt [51]. Ein Vergleich mit Andersen [5] zeigt, dass diese Gleichungen der bekannten Popov-Näherung entsprechen. Sie gelten für $T \lesssim T_c$, und, wenn man für kleine Wechselwirkung die Entleerung des Grundzustandes betrachtet, für $T = 0$. Man kann also davon ausgehen, dass die Gleichungen für kleine Wechselwirkung eine gute Näherung an die wahren Verhältnisse darstellen. Das effektive Potential ohne Unordnung ergibt sich aus dem effektiven Potential mit Unordnung (5.28) zu

$$V_{\text{eff}}(n, n_0) = V \left\{ -\mu n_0 + g \left[\frac{1}{2} n_0^2 - (n - n_0)^2 \right] \right\} + V \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left\{ \frac{1}{2\beta} \sum_{m=-\infty}^\infty \ln \left[\hbar^2 \omega_m^2 + \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn \right)^2 - g^2 n_0^2 \right] e^{i\omega_m \eta} \right\}. \quad (5.47)$$

μ ist durch die Extremalisierung der Freien Energie zu bestimmen. Es fällt auf, dass die Terme, die in der Näherung für die quartischen Fluktuationen (4.13) zur Beibehaltung des Erwartungswertes hinzugefügt wurden, in der Literatur anscheinend oft ignoriert werden, siehe z.B. Andersen [5]. Setzt man allerdings im effektiven Potential $\mu = gn_0$, $n \approx n_0$ wie es in der Theorie oft gemacht wird, da $n - n_0$ bei schwacher Wechselwirkung nur sehr klein ist, so erhält man die bereits bekannten Ergebnisse. Hier soll die etwas exaktere Theorie, welche hier hergeleitet wurde, verwendet werden. Nun ist die Summe über die m auszuwerten. Dazu schreibt man den Logarithmus in eine Summe aus zwei Logarithmen um.

$$\begin{aligned}
V_{\text{eff}}^{(2)} &= V \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left\{ \frac{1}{2\beta} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \ln \left[\hbar^2 \omega_m^2 + \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn \right)^2 - g^2 n_0^2 \right] e^{i\omega_m \eta} \right\} \\
&= V \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left\{ \frac{1}{2\beta} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left[\ln \left(i\hbar \omega_m + \sqrt{\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn \right)^2 - g^2 n_0^2} \right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \ln \left(-i\hbar \omega_m + \sqrt{\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn \right)^2 - g^2 n_0^2} \right) \right] e^{i\omega_m \eta} \right\}. \tag{5.48}
\end{aligned}$$

Die Berechnung dieser Ausdrücke geschieht völlig analog zur Berechnung in Abschnitt 3.4, wobei hier eine Neudefinition von η erfolgt: $\eta_{\text{neu}} = \eta_{\text{alt}}/\hbar$. Das Ergebnis lautet

$$\begin{aligned}
V_{\text{eff}}^{(2)} &= V \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{1}{2\beta} \left\{ \sum_{m=-\infty}^0 \left[-\frac{\beta}{\eta - \beta m} e^{(\beta m - \eta) \sqrt{\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn \right)^2 - g^2 n_0^2}} \right] \right. \\
&\quad \left. + \sum_{m=1}^{\infty} \left[-\frac{\beta}{\beta m - \eta} e^{(\eta - \beta m) \sqrt{\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn \right)^2 - g^2 n_0^2}} \right] \right\}. \tag{5.49}
\end{aligned}$$

Der Grenzübergang $\eta \rightarrow 0$ ist nun in allen Termen, außer dem $m = 0$ -Term, problemlos möglich. Der $m = 0$ -Term wird in eine Reihe in η entwickelt, und alle Terme, die $O(\eta)$ oder höherer Ordnung sind, werden vernachlässigt, da auch hier der Grenzübergang problemlos möglich ist. Man erhält somit

$$\begin{aligned}
V_{\text{eff}}^{(2)} &= V \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{1}{2\beta} \left\{ \sum_{m=1}^{\infty} \left[-\frac{2}{m} e^{-\beta m \sqrt{\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn \right)^2 - g^2 n_0^2}} \right] \right. \\
&\quad \left. - \frac{\beta}{\eta} \left[1 - \eta \sqrt{\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn \right)^2 - g^2 n_0^2} \right] \right\}. \tag{5.50}
\end{aligned}$$

Offenbar ist der Term, der proportional $1/\eta$ ist, von keiner physikalischen Größe abhängig. Eine Konstante im effektiven Potential hat aber keine physikalische Relevanz. Diese im Grenzfall $\eta \rightarrow 0$ auftauchende Divergenz ist also unphysikalisch, und muss daher abgezogen werden. Im übrig gebliebenen Term kann der Grenzübergang $\eta \rightarrow 0$ durchgeführt werden. Man erhält also für das gesamte effektive Potential

$$\begin{aligned}
V_{\text{eff}} &= V \left\{ -\mu n_0 + g \left[\frac{1}{2} n_0^2 - (n - n_0)^2 \right] \right\} \\
&\quad + V \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left\{ \frac{\sqrt{\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn \right)^2 - g^2 n_0^2}}{2} + \frac{1}{\beta} \ln \left[1 - e^{-\beta \sqrt{\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn \right)^2 - g^2 n_0^2}} \right] \right\} \tag{5.51}
\end{aligned}$$

Während der logarithmische Beitrag keinerlei Probleme bei der Berechnung bereitet, muss der nichtlogarithmische Anteil unter dem Integral noch besonders behandelt werden, da er im Prinzip divergent ist. Das Integral wird daher

nun, nach Substitution, mittels Regularisierung behandelt (D.5). Es ist für $D = 3$ Dimensionen in der Literatur bekannt [5], daher wird hier das Ergebnis angegeben:

$$V_{\text{eff}}(n, n_0) = V \left\{ -\mu n_0 + g \left[\frac{1}{2} n_0^2 - (n - n_0)^2 \right] + \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{2}{15} (2gn_0)^{5/2} + \frac{1}{\beta} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^D} \ln \left[1 - \exp \left(-\beta \sqrt{\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn \right)^2 - g^2 n_0^2} \right) \right] \right\}. \quad (5.52)$$

Dieses Ergebnis für das Integral entspricht zwar nicht dem von Fetter und Walecka [31, (22.15)], da hier ein Faktor 4 anders ist, wohl aber dem von Andersen [5, (151)] sowie Lee und Yang [52]. Schließlich möchte man zu Stabilitätsuntersuchungen die Freie Energie F betrachten, die man mittels (5.15) erhält. Sie lautet

$$F(n, n_0) = V \left\{ -\mu n_0 + \mu n + g \left[\frac{1}{2} n_0^2 - (n - n_0)^2 \right] + \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{2}{15} (2gn_0)^{5/2} + \frac{1}{\beta} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^D} \ln \left[1 - \exp \left(-\beta \sqrt{\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn \right)^2 - g^2 n_0^2} \right) \right] \right\}, \quad (5.53)$$

wobei n_0 aus der Teilchendichtegleichung in der Kondensatphase (5.45) zu bestimmen ist. Das chemische Potential muss ebenfalls durch n und n_0 ausgedrückt werden. Eine Extremalisierung der Freien Energie nach n_0 müsste danach die Teilchendichtegleichung in der Kondensatphase (5.45) reproduzieren, was jedoch nicht der Fall ist, wie man bereits auf Grund der Nichtgleichheit der Gross-Pitaevskii-Gleichungen (5.33) und (5.35) erahnen konnte. Die Popov-Theorie verletzt offenbar die Teilchenzahlerhaltung. Eine Stabilitätsuntersuchung kann also nicht durch die Freie Energie erfolgen, da die in diesem Kapitel hergeleiteten Popov-Gleichungen sich nicht aus einem Potential ergeben, dessen Extremum die Freie Energie ist.

Es ergeben sich aus der Teilchendichtegleichung in der Kondensatphase (5.45) im Prinzip zwei mögliche Lösungen in der Kondensatphase, wobei eine durch eine Instabilitätsbedingung wegfallen muss. Die verbliebene Lösung ist stabil. Wie gezeigt wird, ist das entscheidende Kriterium zur Bestimmung der Stabilität die Kompressibilität, die beim instabilen Kondensatzweig negativ wird. Die Lösung $n_0 = 0$ ist oberhalb einer bestimmten Temperatur ebenfalls möglich und stabil. Der Ort des Phasenübergangs wird durch eine Maxwell-Konstruktion im $n - \mu$ -Diagramm festgelegt. Um dies zeigen zu können, benutzt man $g = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{M}$, und es werden zunächst dimensionslose Größen definiert. Es sind

$$\begin{aligned} \tilde{n}_0 &= \frac{n_0}{n}, \\ \tilde{a}_s &= a_s n^{1/3}, \\ \tilde{\mu} &= \frac{M}{8\pi\hbar^2 n^{2/3}} \mu, \\ \tilde{t} &= \frac{M k_B T}{8\pi\hbar^2 n^{2/3}}. \end{aligned} \quad (5.54)$$

Zusätzlich werden weitere dimensionslose Größen festgelegt, die für die Darstellung des chemischen Potentials besser geeignet sind. Es sind

$$\begin{aligned} \bar{\mu} &= \beta \mu, \\ \bar{n} &= n \lambda^3, \\ \bar{n}_0 &= n_0 \lambda^3, \\ \bar{g} &= \beta g \lambda^{-3}. \end{aligned} \quad (5.55)$$

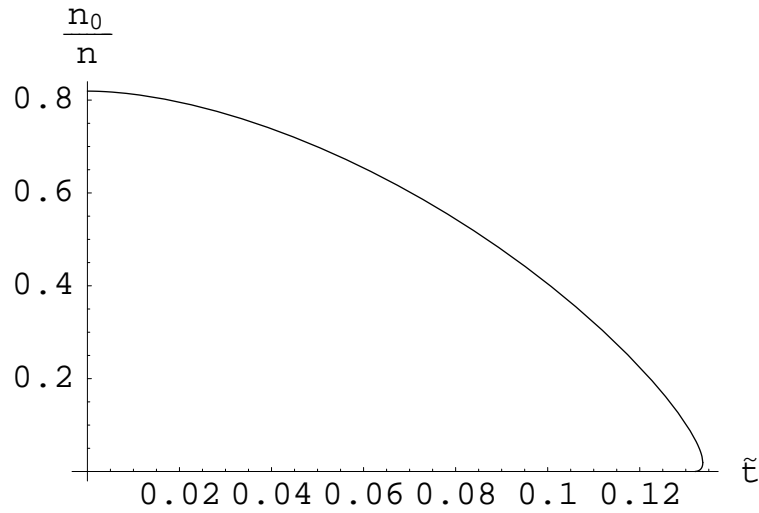


Abbildung 5.1: Popov-Näherung: Mögliche normierte Kondensatdichten n_0/n von ^{87}Rb gegen die dimensionslose Temperatur \tilde{t} aufgetragen. Der untere Ast, der nur für $0,1338 > \tilde{t} > 0,1318$ existiert, ist, wie gezeigt, instabil.

Damit lautet die Teilchendichte in der Kondensatphase (5.45)

$$1 = \tilde{n}_0 + \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \sqrt{\tilde{a}_s \tilde{n}_0}^3 + \frac{16}{\sqrt{\pi}} \tilde{t}^{3/2} \int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon + \frac{\tilde{a}_s}{2\tilde{t}} \tilde{n}_0}{\sqrt{\epsilon + \frac{\tilde{a}_s}{\tilde{t}} \tilde{n}_0} \exp\left[\sqrt{\epsilon^2 + \frac{\tilde{a}_s}{\tilde{t}} \tilde{n}_0 \epsilon}\right] - 1}, \quad (5.56)$$

und in anderen Einheiten

$$\bar{n} = \bar{n}_0 + \frac{\sqrt{8}}{3\sqrt{\pi}} \sqrt{g\bar{n}_0}^3 + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon + g\bar{n}_0}{\sqrt{\epsilon + 2g\bar{n}_0} \exp\left[\sqrt{\epsilon^2 + 2g\bar{n}_0 \epsilon}\right] - 1}. \quad (5.57)$$

Die Teilchendichte in der Gasphase (5.43) hingegen ist

$$1 = 8\tilde{t}^{3/2} \zeta_{3/2} \left[\exp\left(\frac{1}{\tilde{t}}(\tilde{\mu} - \tilde{a}_s)\right) \right] \quad (5.58)$$

und in anderen Einheiten

$$\bar{n} = \zeta_{3/2} [\exp(\bar{\mu} - 2g\bar{n})]. \quad (5.59)$$

Die Gross-Pitaevskii-Gleichung schließlich lautet in der Kondensatphase

$$\bar{\mu} = 2g\bar{n} - g\bar{n}_0. \quad (5.60)$$

5.4.1 Stabiler und instabiler Zweig in der Kondensatphase

Die Kondensatdichte ist durch Gleichung (5.56) bestimmt, wobei es hier für hohe Temperaturen zwei mögliche Lösungen gibt. Damit die Abbildungen übersichtlicher werden, wurde ein Beispielgas gewählt, hier Rubidium-87. Die s-Wellen-Streulänge beträgt $a_s = 100,44 a_0$, wobei a_0 der Bohrsche Radius ist [53]. Eine typische Dichte in einer Falle ist $1,2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ [22]. Damit ist $\tilde{a}_s = 0,026$. Beide möglichen Lösungen der Kondensatdichte sind in Abbildung 5.1 über die dimensionslose Temperatur \tilde{t} aufgetragen.

Es ist noch zu zeigen, welcher der beiden bei hohen Temperaturen möglichen Äste instabil ist. Dies geschieht nachfolgend durch die Bestimmung der Stelle des Phasenübergangs und dem Instabilitätskriterium, welches aus dem $n - \mu$ -Diagramm in Abbildung 5.2 folgt.

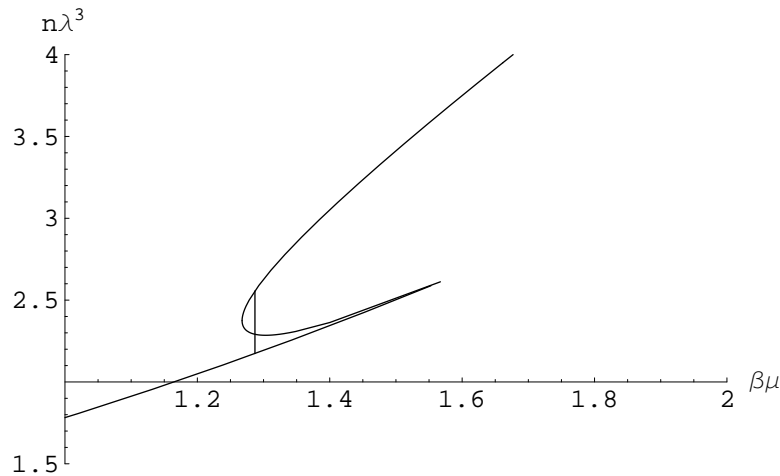


Abbildung 5.2: Popov-Näherung: Teilchendichte n in Einheiten von λ^{-3} gegen das chemische Potential μ in Einheiten von $k_B T$ bei einer Wechselwirkung $\bar{g} = 0,3$ aufgetragen. Die Linie, die auch für kleines chemisches Potential noch existiert, entspricht dem Gaszweig. Die beiden anderen Kurven entsprechen dem instabilen Kondensatzweig (unterer Zweig) und dem stabilen Kondensatzweig (oberer Zweig). Die eingezeichnete Maxwell-Gerade legt die Stelle des Phasenübergangs fest.

5.4.2 Stelle des Phasenübergangs

Zu bestimmen ist nun das chemische Potential in der Gasphase. Man erhält es aus der Teilchendichtegleichung in der Gasphase (5.59), welche man numerisch nach μ auflöst. Analog verfährt man mit dem chemischen Potential in der Kondensatphase, welches man aus der Gross-Pitaevskii-Gleichung (5.60) bekommt. Hierbei sind der stabile und der instabile Zweig aus Abbildung 5.1 zu betrachten, da nur beide Zweige zusammen mit dem Gaszweig ein vollständiges Diagramm der Teilchendichte gegen das chemische Potential liefern. Die Teilchendichte (in Einheiten von λ^{-3}) ist in Abbildung 5.2 gegen das chemische Potential (in Einheiten von $k_B T$) bei einer Wechselwirkung $\bar{g} = 0,3$ aufgetragen. Der Gaszweig ist hierbei derjenige, welcher für beliebig kleines chemisches Potential existiert. Die Kondensatzweige enden für kleines chemisches Potential μ an einem bestimmten chemischen Potential $\bar{\mu}_c = 1,268$. Zusammen bilden sie in der Abbildung eine nach rechts geöffnete Kurve. Der untere Kondensatzweig mündet für das chemische Potential $\bar{\mu}_{\max} = 1,57$ in den Gaszweig ein, wonach diese beiden Zweige verschwinden, und nur der obere Kondensatzweig weiterhin existiert. Eine Maxwell-Konstruktion in Form einer Geraden, die den Gaszweig mit dem oberen Kondensatzweig verbindet, legt den genauen Ort des Phasenübergangs fest. Dazu muss die Fläche zwischen den Kondensatzweigen und der Geraden genau so groß sein wie die Fläche zwischen Gaszweig, unterem Kondensatzweig und der Geraden. Dies führt auf das Ergebnis $\bar{\mu}_{\text{crit}} = 1,287$. Noch zu sehen ist, dass der untere Kondensatzweig knapp rechts von der Maxwell-Geraden eine negative Steigung hat. Dies bedeutet, dass dieser Zweig an dieser Stelle eine negative Kompressibilität hat, und demnach nicht stabil ist (siehe Anhang C). Stabil ist also nach dem Phasenübergang der obere Zweig.

Die Popov-Theorie ist der Limes schwacher Wechselwirkung der in Kapitel 4 hergeleiteten Gleichungen, wenn man die "Popov-Näherung" macht.

5.4.3 Superfluide Dichte

Auch die superfluide Dichte für die Popov-Näherung ohne Unordnung kann bestimmt werden. Da die Gleichungen für die superfluide Dichte jedoch erst später hergeleitet werden, wird die Berechnung am Ende von Abschnitt 5.8,

auf Seite 99, nachgeholt.

5.5 Huang-Meng-Ergebnis für die Entleerung des Grundzustandes

Es soll nun untersucht werden, ob sich das Huang-Meng-Ergebnis für die Entleerung des Grundzustandes durch Unordnung durch die hier präsentierte Theorie reproduzieren lässt. Dazu nehme man erneut lokale Wechselwirkung und räumlich unkorrelierte Unordnung an. Die zu betrachtenden Gleichungen sind die Molekularfeldgleichungen (4.88), (4.89) und (4.94)–(4.96) sowie die Gross-Pitaevskii-Gleichung (4.82). Es fällt auf, dass die Entleerung des Grundzustandes durch die Unordnung im Prinzip von zwei Unordnungsbeiträgen her kommen könnte: Zum einen stehen in der Teilchendichte die K_m und Θ_m mit der Unordnungsstärke R , zum anderen gibt es noch den zusätzlichen Beitrag von κ und θ .

Um zu bestimmen, woher das Huang-Meng-Ergebnis kommen kann, berechne man zunächst die Integrale für K_m in (4.88) und Θ_m in (4.89). Das Integral für die K_m ist im Prinzip divergent. Es muss daher mittels einer Regularisierung und Renormierung behandelt werden. Dazu muss man die Konstante 1 von dem Integral abziehen, analog zum Fall ohne Unordnung, wie es bei der Popov-Theorie in (5.39) geschah. Diese Konstante sollte durch die Summation über die K_m (bei Beachtung der Operatorordnung durch einen Term $e^{i\omega_m\eta}$) wieder hinzuaddiert werden. Alternativ und äquivalent benutzt man dimensionale Regularisierung (D.5), um diese Divergenzen zu behandeln, wie es z.B. von Andersen gemacht wird [5]. Die Gleichung für K_m ist dann

$$\begin{aligned} \frac{K_m}{\hbar} = & \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\pi} \left\{ \frac{i\hbar\omega_m + \frac{R}{2\hbar}(K_m - K_m^*)}{\sqrt{\left(i\hbar\omega_m + \frac{R}{2\hbar}(K_m - K_m^*)\right)^2 + \left|g(n_0 + \xi) - \frac{R}{\hbar}\Theta_m\right|^2}} \right. \\ & \left[\sqrt{-\mu + 2gn - \frac{R}{2\hbar}(K_m^* + K_m) - \sqrt{\left(i\hbar\omega_m + \frac{R}{2\hbar}(K_m - K_m^*)\right)^2 + \left|g(n_0 + \xi) - \frac{R}{\hbar}\Theta_m\right|^2}} \right. \\ & \left. - \sqrt{-\mu + 2gn - \frac{R}{2\hbar}(K_m^* + K_m) + \sqrt{\left(i\hbar\omega_m + \frac{R}{2\hbar}(K_m - K_m^*)\right)^2 + \left|g(n_0 + \xi) - \frac{R}{\hbar}\Theta_m\right|^2}} \right] \\ & - \left[\sqrt{-\mu + 2gn - \frac{R}{2\hbar}(K_m^* + K_m) - \sqrt{\left(i\hbar\omega_m + \frac{R}{2\hbar}(K_m - K_m^*)\right)^2 + \left|g(n_0 + \xi) - \frac{R}{\hbar}\Theta_m\right|^2}} \right. \\ & \left. + \sqrt{-\mu + 2gn - \frac{R}{2\hbar}(K_m^* + K_m) + \sqrt{\left(i\hbar\omega_m + \frac{R}{2\hbar}(K_m - K_m^*)\right)^2 + \left|g(n_0 + \xi) - \frac{R}{\hbar}\Theta_m\right|^2}} \right] \left. \right\}. \end{aligned} \quad (5.61)$$

Die Gleichung für die Θ_m hingegen lautet

$$\begin{aligned} \frac{\Theta_m}{\hbar} = & \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\pi} \frac{g(n_0 + \xi) - \frac{R}{\hbar}\Theta_m}{\sqrt{\left(i\hbar\omega_m + \frac{R}{2\hbar}(K_m - K_m^*) \right)^2 + \left| g(n_0 + \xi) - \frac{R}{\hbar}\Theta_m \right|^2}} \\ & \left(\sqrt{-\mu + 2gn - \frac{R}{2\hbar}(K_m^* + K_m) - \sqrt{\left(i\hbar\omega_m + \frac{R}{2\hbar}(K_m - K_m^*) \right)^2 + \left| g(n_0 + \xi) - \frac{R}{\hbar}\Theta_m \right|^2}} \right. \\ & \left. - \sqrt{-\mu + 2gn - \frac{R}{2\hbar}(K_m^* + K_m) + \sqrt{\left(i\hbar\omega_m + \frac{R}{2\hbar}(K_m - K_m^*) \right)^2 + \left| g(n_0 + \xi) - \frac{R}{\hbar}\Theta_m \right|^2}} \right). \end{aligned} \quad (5.62)$$

In 1. Ordnung in R und für kleine Wechselwirkung sieht man, dass die Wechselwirkung in den Gleichungen stets nur in der Ordnung $O(\sqrt{g})$ auftaucht. Das bedeutet, dass

$$K_m, \Theta_m = O(\sqrt{g}). \quad (5.63)$$

Das Huang-Meng-Resultat bräuchte jedoch $O(\sqrt{1/g})$, die gegen (5.63) dominiert, sodass es nicht von diesen Termen kommen kann. Man nimmt nun kleine Wechselwirkung und kleine Unordnung an, wobei die Unordnung in einem bestimmten Verhältnis zur Wechselwirkung stehen muss. Die genauen Bedingungen lauten:

$$\begin{aligned} (a_s n_0)^{3/2} & \ll n, \\ \frac{RM^2}{\sqrt{a_s n_0} 8\hbar^4 \pi^{3/2}} & \ll 1. \end{aligned} \quad (5.64)$$

Damit die führenden Wechselwirkungs- und Unordnungsterme, die aus den dann entstehenden Gleichungen folgen, etwa von der gleichen Größenordnung sind, kann man zusätzlich fordern, dass

$$\frac{RM^2}{8\hbar^4 \pi^{3/2}} \sqrt{\frac{n_0}{a_s}} = O(a_s n_0)^{3/2}. \quad (5.65)$$

Forderte man dies nicht, wäre ein Term also deutlich größer als der andere, so wären die weiteren Ordnungen in der unordnungsfreien Wechselwirkung oder in der Unordnung wichtiger als der jeweils andere Term, sodass man diesen hätte vernachlässigen sollen. Damit lassen sich einige Näherungen durchführen. Auf Grund der soeben erhobenen Forderungen sind die Korrelationen sehr klein, Man definiert also, dass alle Korrelationen von der Größenordnung eines künstlichen Kleinheitsparameters γ sind. Damit sind dann

$$\kappa, K_m, \xi, \theta, \Theta_m = O(\gamma). \quad (5.66)$$

Die dann entstehende Teilchendichtegleichung lautet

$$\begin{aligned} n = & n_0 + \gamma \lim_{\eta \searrow 0} \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{i\omega_m \eta} \frac{i\hbar\omega_m + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn}{\beta [\hbar^2 \omega_m^2 + (\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn)^2 - g^2 n_0^2]} \\ & + \gamma \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{Rn_0}{\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn + gn_0 \right)^2} + O(\gamma^2), \end{aligned} \quad (5.67)$$

während die Gross-Pitaevskii-Gleichung sich zu

$$[-\mu + 2gn - gn_0] \sqrt{n_0} = O(\gamma) \quad (5.68)$$

vereinfacht. Die Berechnung der Integrale ergibt nach Einsetzen der Gross-Pitaevskii-Gleichung und teilweiser Benutzung von $g = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{M}$.

$$n = n_0 + \gamma \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \sqrt{a_s n_0}^3 + \gamma \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty d\epsilon \left[\frac{\epsilon + gn_0}{\sqrt{\epsilon + 2gn_0}} \frac{1}{e^{\beta\sqrt{\epsilon^2 + 2gn_0\epsilon}} - 1} \right] + \gamma \frac{RM^2}{8\hbar^4 \pi^{3/2}} \sqrt{\frac{n_0}{a_s}} + O(\gamma^2). \quad (5.69)$$

Ein Vergleich mit Huang und Meng [18] und Setzen von $\gamma = 1$ zeigt sofort, dass dieses Ergebnis mit dem dort erhaltenen übereinstimmt.

5.6 Erweiterung des Huang-Meng-Resultats

Dem aufmerksamen Leser mag aufgefallen sein, dass eine der Annahmen in Abschnitt 5.5 unnötig war. Man kann nämlich auf Annahme (5.65) verzichten. Ist man nun explizit an den Effekten großer Unordnung interessiert, so kann man die Annahmen in (5.64) durch folgende ersetzen:

$$\frac{(a_s n_0)^{3/2}}{n} \ll \frac{RM^2}{8\pi^{3/2} \hbar^4 \sqrt{a_s n_0}} < 1. \quad (5.70)$$

Die Unordnungsbeiträge sollen also auch für höhere Potenzen von R viel wichtiger sein als der reine Wechselwirkungsbeitrag. Eine Lösung ist auch dann möglich. Der Grund hierfür wird bald offensichtlich. Damit alle mitgenommenen Terme relevant sind, ist außerdem zu fordern, dass die mitgenommenen Unordnungsterme mindestens von der selben Grössenordnung sind wie der reine Wechselwirkungsterm, und zusätzlich, dass der Unordnungsbeitrag $\propto R/\sqrt{a_s}$ der einzige wichtige ist. (Mit anderen Worten: Terme, die $O(R)$ oder sogar $O(R\sqrt{a_s})$ sind, sind vernachlässigbar klein.) Dann kann man die κ -Gleichung wie folgt nähern:

$$\kappa = \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{R(n_0 + \kappa) \left[\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn \right)^2 + (gn_0)^2 \right] - 2R(n_0 + \theta) \left[\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn \right) (gn_0) \right]}{\left[\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn \right)^2 - (gn_0)^2 \right]^2}. \quad (5.71)$$

Für θ gilt in der Kondensatphase $\theta = \kappa$, ansonsten $\theta = 0$. Die Teilchendichtegleichung ist dann

$$n = n_0 + \lim_{\eta \searrow 0} \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{i\omega_m \eta} \frac{i\hbar\omega_m + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn}{\beta[\hbar^2 \omega_m^2 + \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn \right)^2 - g^2 n_0^2]} \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{R(n_0 + \kappa) \left[\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn \right)^2 + (gn_0)^2 \right] - 2R(n_0 + \theta) \left[\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn \right) (gn_0) \right]}{\left[\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn \right)^2 - (gn_0)^2 \right]^2}. \quad (5.72)$$

In Analogie zu Abschnitt 5.5 lässt sich dies für die Kondensatphase berechnen. Das Ergebnis lautet

$$n = n_0 + \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \sqrt{a_s n_0}^3 + \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty d\epsilon \left[\frac{\epsilon + gn_0}{\sqrt{\epsilon + 2gn_0}} \frac{1}{e^{\beta\sqrt{\epsilon^2 + 2gn_0\epsilon}} - 1} \right] + \frac{RM^2}{8\hbar^4 \pi^{3/2}} \frac{(\kappa + n_0)}{\sqrt{a_s n_0}}. \quad (5.73)$$

Die κ -Gleichung lässt sich im Rahmen dieser Näherung exakt lösen. Das Ergebnis lautet

$$\kappa = \frac{n_0}{1 - \frac{RM^2}{8\hbar^4 \pi^{3/2} \sqrt{a_s n_0}}} \frac{RM^2}{8\hbar^4 \pi^{3/2} \sqrt{a_s n_0}}. \quad (5.74)$$

Damit folgt für die Teilchendichte

$$n = n_0 + \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \sqrt{a_s n_0}^3 + \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty d\epsilon \left[\frac{\epsilon + gn_0}{\sqrt{\epsilon + 2gn_0}} \frac{1}{e^{\beta\sqrt{\epsilon^2 + 2gn_0\epsilon}} - 1} \right] + \frac{RM^2}{8\hbar^4\pi^{3/2}} \frac{n_0}{\sqrt{a_s n_0}} \frac{1}{1 - \frac{RM^2}{8\hbar^4\pi^{3/2}\sqrt{a_s n_0}}}. \quad (5.75)$$

Mit Hilfe der Forderung (5.70), die nun einsichtig sein sollte, kann man dann die Entleerung des Grundzustandes in eine Reihe entwickeln, um die Ordnung in R deutlich zu machen. Man erhält

$$n = n_0 + \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \sqrt{a_s n_0}^3 + \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty d\epsilon \left[\frac{\epsilon + gn_0}{\sqrt{\epsilon + 2gn_0}} \frac{1}{e^{\beta\sqrt{\epsilon^2 + 2gn_0\epsilon}} - 1} \right] + \frac{RM^2}{8\hbar^4\pi^{3/2}} \frac{n_0}{\sqrt{a_s n_0}} \left[1 + \frac{RM^2}{8\hbar^4\pi^{3/2}\sqrt{a_s n_0}} + \left(\frac{RM^2}{8\hbar^4\pi^{3/2}\sqrt{a_s n_0}} \right)^2 + \dots \right]. \quad (5.76)$$

Wie bereits bei der Diskussion in Abschnitt 5.5 zu erkennen, sind alle Terme, die von den K_m oder den Θ_m kommen können, von höherer Ordnung in der Wechselwirkung. Selbst wenn die zusätzlichen Terme, um die das Huang-Meng-Resultat hier erweitert wurde, klein sein sollten, beispielsweise kleiner als andere Wechselwirkungsbeiträge, so geben sie doch in jeder Ordnung der Unordnung R die jeweils niedrigste Ordnung in der Wechselwirkung a_s an. Insbesondere in dem Fall, dass R groß wird, werden aber die bisher vernachlässigten Terme der Wechselwirkung in den Unordnungsbeiträgen im Prinzip wichtig. Dies kann man umgehen, wenn man fordert, dass die Wechselwirkung verschwindend klein ist. Eine Betrachtung der Auswirkungen dieser Forderung findet sich in Abschnitt 5.10.

5.7 Notwendige Näherungen und Entwicklungen

Wie bereits in Abschnitt 4.5 erwähnt, hat die Hartree-Fock-Bogoliubov-Theorie das grundsätzliche Problem, dass die Dispersion nicht bandlückenfrei ist. Neben dem theoretischen Widerspruch zum Hugenholtz-Pines-Theorem [41] gibt es noch das Problem der Berechenbarkeit: Wenn das Spektrum nicht bandlückenfrei ist, ist eine Berechnung der entstehenden Integrale sehr schwierig. Dieses Problem der Berechenbarkeit betrifft vor allem die Kondensatphase. Es ist also notwendig und wünschenswert, die Gleichungen zu nähern.

Bevor man zu anderen Überlegungen übergeht, ist festzustellen, welche Näherungen notwendig sind, damit man die Summe in der Teilchendichtegleichung (4.95) ausführen kann. Dazu betrachte man die Gleichungen für K_m in (5.61) und Θ_m in (5.62). Diese Gleichungen können analytisch anscheinend nicht so aufgelöst werden, dass man die Ergebnisse analytisch verwenden kann. Jede Mitnahme von K_m oder Θ_m muss also störungstheoretisch erfolgen. In einer ersten Näherung muss man diese also vernachlässigen, man kann aber auch die erste Ordnung mitnehmen, und dann die zweite vernachlässigen, in der nur noch Terme von der Form RK_m oder $R\Theta_m$ auftauchen. Möchte man diese Terme "zweiter Ordnung" mitnehmen, so beinhaltet die dann folgende Entwicklung weitere Integrale, die ebenfalls nur schwer zu lösen sind. Es stellt sich heraus, dass Formel (D.5) hier zu Problemen führt, weil die Γ -Funktion an Argumenten auszuwerten ist, an denen sie für $D = 3$ Dimensionen nicht definiert ist. Hier wäre also eine Betrachtung der Divergenzen in D Dimensionen durchzuführen. Zusätzlich treten Integrale auf, die mit dieser Methode überhaupt nicht berechenbar sind, aber nach Regularisierung verlangen, da sie formal unendlich groß sind. Die Mitnahme dieser Terme ist also mit dieser Methode nicht möglich, weder in der Gleichung für die Teilchendichte in (4.95) noch in Gleichung für ξ in (4.96).

Zusätzlich folgt jetzt das Problem der fehlenden Bandlückenfreiheit. Dies hängt eng zusammen mit dem grundsätzlichen Problem der Hartree-Fock-Bogoliubov-Näherung. Shi und Griffin begründeten dies damit, dass Diagramme inkonsistent mitgenommen würden [43]. Sie beriefen sich dabei auf die Arbeit von Proukakis, Burnett und Stoof [44]. Demnach werden die Diagramme bereits bei der T-Matrix-Methode berücksichtigt [30].

Mit diesen Überlegungen im Sinn folgen im Wesentlichen drei Möglichkeiten, die Gleichungen zu nähern:

5.7.1 T-Matrix

Die sinnvollste Möglichkeit, die bei beliebiger Temperatur gültig ist, und die einfach berechenbar ist, scheint zu sein, dass man T-Matrix-Renormierung betreibt, und diese bis zur ersten Ordnung berücksichtigt. Wegen der nicht bekannten Renormierungsvorschrift für die Unordnung muss man aber die Terme K_m und Θ_m in zweiter Ordnung ebenfalls vernachlässigen, also dort, wo sie nur noch in der Form RK_m und $R\Theta_m$ auftauchen. Danach muss man die anormalen Korrelationen streichen, wie von Popov zuerst vorgeschlagen. Allerdings ist zu beachten, dass die Terme in der Teilchendichte, die temperaturunabhängig sind, nicht genähert werden dürfen, auch wenn sie von den anormalen Korrelationen kommen. Der Grund liegt hier darin, dass sie genau so groß sind wie die Terme, die von den normalen Korrelationen kommen, und nicht einsichtig ist, dass sie bereits an anderer Stelle behandelt wurden, wie es laut Shi und Griffin bei der Wechselwirkung der Fall ist. In der T-Matrix-Theorie werden die Terme, die von den anormalen Korrelationen kommen, bereits in der Vielteilchenstreuematrix verarbeitet. In niedrigster Ordnung sagt diese Theorie nach Stoof und Bijlsma [30], dass

$$g = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{M}. \quad (5.77)$$

Im Prinzip wäre es möglich, weitere Terme dieser Wechselwirkungsstärke mitzunehmen, aber es ist deutlich aufwändiger, weshalb dies hier unterbleibt. Die Näherung in den Feldern lautet mit diesen Überlegungen:

$$\begin{aligned} R\Theta_m &= 0, \\ RK_m &= 0, \\ \xi &= 0. \end{aligned} \quad (5.78)$$

Dies ist die in Abschnitt 5.6 verwendete Näherung. Der Vorfaktor R erinnert daran, dass K_m und Θ_m erst in zweiter Ordnung vernachlässigt werden, wo diese Terme nur in der dort angegebenen Form auftauchen. Wenn man zusätzlich nähert

$$\kappa = \theta = 0, \quad (5.79)$$

bekommt man das Huang-Meng-Resultat, sodass diese Näherung zumindest in niedrigster Ordnung Vertrauen verdient. Dies ist äquivalent zu sehr schwacher Wechselwirkung.

5.7.2 Hochtemperaturlimes

Wie in Anhang A erläutert, ist die Reihe, welche in der Teilchendichtegleichung (4.95) aufzusummieren ist, eine Hochtemperaturreihe. Wenn man sich bei hohen Temperaturen befindet, dann ist derjenige Term, welcher durch $m = 0$ charakterisiert ist, der dominante Term. Nimmt man also nur den Term für $m = 0$ mit, so dürfte das Ergebnis für einen kleinen Bereich um eine "hohe" Temperatur richtig sein. Diese "hohe" Temperatur sollte die kritische Temperatur sein, wenn man der üblichen Philosophie hinter der Hochtemperaturentwicklung in der Bose-Einsein-Kondensation folgt.

Es steht zu erwarten, dass die Näherung, dass man nur den $m = 0$ -Term mitnimmt für sehr hohe Temperaturen $T \approx T_c$ bessere Ergebnisse liefert als die Näherung in Abschnitt 5.7.1, aber für niedrigere Temperaturen kann diese Hoffnung nicht aufrecht erhalten werden. Da man das gesamte Problem aber umgehen kann, wenn man die Hartree-Fock-Näherung macht, ist diese Hochtemperaturnäherung nicht besonders interessant, und es wird auf die Arbeit von Graham und Pelster verwiesen [25]. Den Tieftemperaturbereich hingegen behandelt der folgende Abschnitt.

5.7.3 Tieftemperaturlimit

Für niedrigere Temperaturen muss man in der Teilchendichtegleichung (4.95) die komplette Reihe mitnehmen. Im Tieftemperaturlimit werden die Abstände zwischen den ω_m sehr klein, da die Frequenzen proportional zur Temperatur sind: $\omega_m \propto T$. Die dominanten Beiträge der Reihe sind wiederum die für kleine m , denn die Reihe fällt quadratisch in den ω_m , siehe dazu die Teilchendichtegleichung (4.95). Für die ω_m gilt bekanntermaßen

$$\omega_m = \frac{2\pi k_B T}{\hbar} m. \quad (5.80)$$

Auf Grund der Stetigkeit in den ω_m , wie sie aus der Gleichung für die K_m (5.61) ersichtlich ist, gilt für sehr tiefe Temperaturen und kleinen m

$$RK_m \approx RK_0. \quad (5.81)$$

Diese Näherung soll also nur in zweiter Ordnung durchgeführt werden, was durch den scheinbar sinnlosen Vorfaktor R angedeutet wird. Man kann nun vermuten, dass die relevanten Beiträge allesamt von diesen Termen kommen. Mit dieser Näherung kann man die Gleichungen ebenfalls behandeln, was auch das wichtigste Argument für die Verwendung dieser Näherung ist. In Analogie zur Diskussion im ersten Abschnitt dieses Kapitels muss man allerdings berücksichtigen, dass man Diagramme überzählt. Dies scheint nur für die anormalen Korrelationen aufzutreten, also in den Feldern ξ und Θ_m sowie evtl. θ , siehe dazu deren Definitionen mittels (4.22), (4.24), (4.38) und (4.43). Man umgeht das Problem daher mit der Näherung

$$\begin{aligned} \xi &= 0, \\ \Theta_m &= 0. \end{aligned} \quad (5.82)$$

Diese Näherung geschieht völlig analog zur Popov-Theorie, und widerspricht demnach erwartungsgemäß auch den Gleichungen für ξ (4.85) und Θ_m (4.89), da man diese Gleichungen zusätzlich fordert, und die ursprünglichen Gleichungen demnach aufgegeben werden müssen. Es ist zwar richtig, dass die anormalen Korrelationen größer werden als die normalen Korrelationen, aber bei dieser Begründung ist nicht berücksichtigt, dass man die anormalen Korrelationen überzählt. Um dies zu vermeiden, werden sie nicht berücksichtigt. θ wird aus den schon zuvor genannten Gründen nicht genähert: Diese Terme scheinen nicht überzählt zu werden. Wenn man sie ebenfalls vernachlässigt, kann das Huang-Meng-Ergebnis nicht mehr reproduziert werden.

Die Näherung hat den Vorteil, dass nunmehr die Bandlückenfreiheit der Dispersion garantiert wird: Für $m = 0$ und $\mathbf{k} = 0$ muss der Nenner in den Gleichungen für K_m (4.88) und Θ_m (4.89) nach Einsetzen der Gross-Pitaevskii-Gleichung (4.82) verschwinden. Fordert man Bandlückenfreiheit, und für $R = 0$ den Übergang zur Popov-Theorie, so ergibt sich die Forderung

$$g\xi - \frac{R}{\hbar}\Theta_0 = 0. \quad (5.83)$$

Auch diese Gleichung widerspricht der Gleichung für ξ (4.85) bzw. der für Θ_m (4.89), was ebenfalls wegen dieser zusätzlich erhobenen Forderung zu erwarten war. Mit dem Argument, dass man Terme überzählt, ist die

Forderung nach Bandlückenfreiheit demnach erfüllt. Eine mathematische Beschreibung des Gültigkeitsbereiches (sofern vorhanden) wird hier nicht angegeben. Ergebnisse, die auf der Näherung $RK_m \approx RK_0$ beruhen, sind jedoch mit Vorsicht zu behandeln und müssen bei Interpretationen von Experimenten stets kritisch betrachtet werden. Es ist nicht klar, ob diese Näherung gerechtfertigt ist.

Chemisches Potential

Nimmt man diese Tieftemperaturnäherung ernst, so erweist sich, dass das chemische Potential bei gegebener Teilchendichte dann nicht konsistent bestimmt werden kann. Sowohl die Forderung der Bandlückenfreiheit (5.83) als auch die Vernachlässigung der anormalen Korrelationen mittels (5.82) führen dazu, dass die Isothermen im Diagramm der Teilchendichte n gegen das chemische Potential μ nicht mehr stetig ineinander übergehen. Dies geschieht trotz der physikalischen Motivation der Näherung. Es ist anscheinend nicht gestattet, die anormalen Korrelationen für die Berechnung des chemischen Potentials zu vernachlässigen, was in Gleichung (5.82) geschah, bzw. Bandlückenfreiheit zu fordern (5.83). Dies ist möglicherweise dadurch zu erklären, dass man die Teilchenzahlerhaltung verletzt, wenn man Bandlückenfreiheit fordert. Eine Möglichkeit, die nicht zu Unstetigkeiten im chemischen Potential führt, ist die möglichst exakte Mitnahme der anormalen Korrelationen. Das chemische Potential bestimmt sich damit aus der Gross-Pitaevskii-Gleichung, wenn man in der Kondensatphase ist, also aus

$$\left[-\mu + 2U(\mathbf{k} = \mathbf{0})n + U(\mathbf{k} = \mathbf{0})\xi - U(\mathbf{k} = \mathbf{0})n_0 - \frac{R(\mathbf{k} = \mathbf{0})}{\hbar}(K_0 + \Theta_0) \right] \sqrt{n_0} = 0, \quad (5.84)$$

und aus der Teilchendichtegleichung, sofern man sich nicht im Kondensat befindet, also aus Gleichung (4.95).

5.7.4 Theorie für $T=0$ und sehr schwache Wechselwirkung

Für $T = 0$ kann man auf den Spezialfall sehr schwacher Wechselwirkung bei gleichzeitig starker Unordnung spezialisieren. Dies geschieht durch Vernachlässigung der Bogoliubov-Terme in der Teilchendichtegleichung, also der m -Summe in den Gleichungen für n in (4.95) und ξ in (4.85) und unter Beachtung der Substitution für schnell fallende Unordnungskorrelation und Wechselwirkung (5.8). Folglich müssen auch K_0 und Θ_0 in der Gross-Pitaevskii-Gleichung vernachlässigt werden. Damit lautet die Teilchendichtegleichung für diesen Spezialfall

$$n = n_0 + \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left\{ \frac{R(\mathbf{k})(n_0 + \kappa) \left[\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2U(\mathbf{k})n \right)^2 + (U(\mathbf{k})(n_0 + \xi))^2 \right]}{\left[\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2U(\mathbf{k})n \right)^2 - (U(\mathbf{k})(n_0 + \xi))^2 \right]^2} - \frac{2R(\mathbf{k})(n_0 + \theta) \left[\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2U(\mathbf{k})n \right) (U(\mathbf{k})(n_0 + \xi)) \right]}{\left[\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2U(\mathbf{k})n \right)^2 - (U(\mathbf{k})(n_0 + \xi))^2 \right]^2} \right\}. \quad (5.85)$$

Vergleicht man dies mit Gleichung für κ in (4.94), so erkennt man, dass in dieser Beschreibung gilt

$$n - n_0 = \kappa. \quad (5.86)$$

Im Falle gebrochener Symmetrie gilt außerdem

$$\theta = \kappa, \quad (5.87)$$

sonst $\theta = 0$. Für das Feld ξ gilt nach (4.85)

$$\xi = \theta, \quad (5.88)$$

im Falle gebrochener Symmetrie also

$$\xi = n - n_0, \quad (5.89)$$

und $\xi = 0$ sonst. Dies ist jedoch im Widerspruch zur Forderung nach der Bandlückenfreiheit (5.83), wonach auch im Falle gebrochener Symmetrie $\xi = 0$ gilt. Man muss also entscheiden, ob die Forderung nach Bandlückenfreiheit oder die hergeleitete Gleichung für ξ in (4.85) wichtiger ist, um das Verhalten des Systems richtig zu beschreiben. Für die Kondensatdichte macht dies offenbar keinen Unterschied, aber jeweils auftretende Probleme bei der superfluiden Dichte und beim chemischen Potential führen zu Forderungen in zwei gegensätzliche Richtungen, wie in Abschnitt 5.10 gezeigt wird. Die Teilchendichtegleichung lautet demnach

$$n = n_0 + \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left\{ \frac{R(\mathbf{k})n \left[\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2U(\mathbf{k})n \right)^2 + (U(\mathbf{k})(n_0 + \xi))^2 \right]}{\left[\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2U(\mathbf{k})n \right)^2 - (U(\mathbf{k})(n_0 + \xi))^2 \right]^2} - \frac{2R(\mathbf{k})(n_0 + \theta) \left[\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2U(\mathbf{k})n \right) (U(\mathbf{k})(n_0 + \xi)) \right]}{\left[\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2U(\mathbf{k})n \right)^2 - (U(\mathbf{k})(n_0 + \xi))^2 \right]^2} \right\}. \quad (5.90)$$

Die Gross-Pitaevskii-Gleichung ist dann nach Vergleich mit (5.12) :

$$[-\mu + 2U(\mathbf{k} = \mathbf{0})n + U(\mathbf{k} = \mathbf{0})\xi - U(\mathbf{k} = \mathbf{0})n_0] \sqrt{n_0} = 0. \quad (5.91)$$

5.8 Superfluide Dichte

Es soll der Anteil der superfluiden Dichte an der Teilchendichte für beliebige Temperatur berechnet werden. Die Teilchendichte bei $T = 0$ ist nicht notwendig gleich der superfluiden Dichte, wie Huang und Meng für schwache Unordnung zeigen [18]. Es gibt also keinen Grund dafür, zu vermuten, dass dies bei endlicher Temperatur anders wäre. Die Idee hinter der hier verwendeten Methode der Berechnung der superfluiden Dichte ist wie folgt: Man untersucht den Einfluss der Ankopplung eines äußeren Geschwindigkeitsfeldes mit Geschwindigkeit \mathbf{u} an das System. Nur die normalfluiden Teilchen reagieren darauf. Mathematisch betrachtet man die Wirkung (4.9) mit den Teilen (4.16), (4.26) und (4.27). Die Wirkung wird dann durch die Ankopplung des Systemimpulses \mathbf{p} an die Geschwindigkeit \mathbf{u} modifiziert, und zwar mittels

$$\mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A} + \mathbf{u} \cdot \mathbf{p}. \quad (5.92)$$

Der Systemimpuls \mathbf{p} ist hierbei definiert durch den Erwartungswert des Impulsoperators,

$$\mathbf{p} = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \psi^*(\mathbf{x}, \tau) \frac{\hbar}{i} \nabla \psi(\mathbf{x}, \tau). \quad (5.93)$$

Die Änderung des großkanonischen Potentials wird dann durch das Differential

$$d\Omega = -SdT - pdV - Nd\mu + \mathbf{p} \cdot d\mathbf{u} \quad (5.94)$$

beschrieben. Der letzte Term beschreibt hier die Ankopplung des äußeren Geschwindigkeitsfeldes. Für diesen gilt offenbar

$$\mathbf{p} = MVn_n\mathbf{u} + \dots \quad (5.95)$$

Hierbei stellt n_n die normalfluide Dichte dar. Da die Summe von superfluider Dichte n_s und normalfluider Dichte n_n die Gesamtdichte n ergibt, lässt sich daraus die superfluide Dichte berechnen [54, Kapitel 8]:

$$n_s = n - n_n. \quad (5.96)$$

Mit Hilfe der Modifikation (5.92) und anschließend einem Vorgehen völlig analog zu dem in Kapitel 4 kann man dann die neue Wirkung berechnen. Das Ergebnis im neuen Bezugssystem lautet (vgl. die Teilwirkungen (4.16), (4.26) und (4.27))

$$\begin{aligned} \mathcal{A}[\delta\psi^*, \delta\psi] &= \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \sum_{\alpha=1}^N \left\{ \Psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta + \frac{\hbar}{i} \mathbf{u} \nabla - \mu \right] \Psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \right. \\ &+ \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta + \frac{\hbar}{i} \mathbf{u} \nabla - \mu \right] \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \\ &\frac{1}{2} \int d^D x' U(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \left[\Psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}', \tau) \Psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha}(\mathbf{x}', \tau) \right. \\ &+ (\Psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}', \tau) + \xi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau)) \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}', \tau) \\ &+ (\Psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha}(\mathbf{x}', \tau) + \xi_{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau)) \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}', \tau) \\ &+ (\Psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) + s_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau)) \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}', \tau) \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}', \tau) \\ &+ (\Psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}', \tau) \Psi_{\alpha}(\mathbf{x}', \tau) + s_{\alpha}^*(\mathbf{x}', \tau)) \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \\ &+ (\Psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha}(\mathbf{x}', \tau) + \sigma_{\alpha}(\mathbf{x}', \mathbf{x}, \tau)) \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}', \tau) \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \\ &+ (\Psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}', \tau) \Psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) + \sigma_{\alpha}^*(\mathbf{x}', \mathbf{x}, \tau)) \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}', \tau) \\ &\left. - s_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) s_{\alpha}^*(\mathbf{x}', \tau) - \sigma_{\alpha}(\mathbf{x}', \mathbf{x}, \tau) \sigma_{\alpha}^*(\mathbf{x}', \mathbf{x}, \tau) - \xi_{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau) \xi_{\alpha}^*(\mathbf{x}', \mathbf{x}, \tau) \right\} \\ &- \frac{1}{2\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x \int d^D x' \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\alpha'=1}^N R(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \\ &\left[\Psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \Psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') \right. \\ &+ (\Psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') + \Theta_{\alpha\alpha'}^*(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau')) \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') \\ &+ (\Psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') + \Theta_{\alpha\alpha'}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau')) \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \\ &+ (\Psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) + s_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau)) \delta\psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \delta\psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') \\ &+ (\Psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \Psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') + s_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau')) \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \\ &+ (\Psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \Psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) + K_{\alpha\alpha'}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau')) \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') \\ &+ (\Psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') + K_{\alpha\alpha'}^*(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau')) \delta\psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \\ &- s_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) s_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') - K_{\alpha\alpha'}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') K_{\alpha\alpha'}^*(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') \\ &\left. - \Theta_{\alpha\alpha'}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') \Theta_{\alpha\alpha'}^*(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') \right] \quad (5.97) \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned}
 \tilde{\mathcal{A}}[\delta\psi^*, \delta\psi] &= \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \sum_{\alpha=1}^N \left\{ \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta + \frac{\hbar}{i} \mathbf{u} \nabla - \mu \right] \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \right. \\
 &\quad \frac{1}{2} \int d^D x' U(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \\
 &\quad \left[(\Psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}', \tau) + \xi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau)) \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}', \tau) \right. \\
 &\quad + (\Psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha}(\mathbf{x}', \tau) + \xi_{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau)) \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}', \tau) \\
 &\quad + (\Psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) + s_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau)) \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}', \tau) \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}', \tau) \\
 &\quad + (\Psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}', \tau) \Psi_{\alpha}(\mathbf{x}', \tau) + s_{\alpha}^*(\mathbf{x}', \tau)) \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \\
 &\quad + (\Psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha}(\mathbf{x}', \tau) + \sigma_{\alpha}(\mathbf{x}', \mathbf{x}, \tau)) \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}', \tau) \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \\
 &\quad \left. \left. + (\Psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}', \tau) \Psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) + \sigma_{\alpha}^*(\mathbf{x}', \mathbf{x}, \tau)) \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}', \tau) \right] \right\} \\
 &\quad - \frac{1}{2\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x \int d^D x' \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\alpha'=1}^N R(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \\
 &\quad \left[(\Psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') + \Theta_{\alpha\alpha'}^*(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau')) \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') \right. \\
 &\quad + (\Psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') + \Theta_{\alpha\alpha'}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau')) \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \\
 &\quad + (\Psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) + s_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau)) \delta\psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \delta\psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') \\
 &\quad + (\Psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \Psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') + s_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau')) \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \\
 &\quad + (\Psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \Psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) + K_{\alpha\alpha'}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau')) \delta\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \delta\psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') \\
 &\quad \left. + (\Psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') + K_{\alpha\alpha'}^*(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau')) \delta\psi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}', \tau') \delta\psi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \right]. \quad (5.98)
 \end{aligned}$$

Diese Wirkung $\tilde{\mathcal{A}}$ lässt sich nun analog zu Gleichung (4.56) in eine Matrixmultiplikation umschreiben. Das Ergebnis für den dort auftauchenden Integralkern $G_{\alpha\alpha'}^{-1}$ lautet

$$\begin{aligned}
 G_{\alpha\alpha'}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') &= \delta_{\alpha\alpha'} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(\tau - \tau') \begin{pmatrix} \hbar \frac{\partial}{\partial \tau'} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta' + \frac{\hbar}{i} \mathbf{u} \nabla' - \mu & 0 \\ 0 & -\hbar \frac{\partial}{\partial \tau'} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta' - \frac{\hbar}{i} \mathbf{u} \nabla' - \mu \end{pmatrix} \\
 &\quad + \delta_{\alpha\alpha'} \delta(\tau - \tau') \begin{pmatrix} U(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) [2n_0 + s + \sigma(\mathbf{x}' - \mathbf{x})] & U(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) [n_0 + \xi(\mathbf{x} - \mathbf{x}')] \\ U(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) [n_0 + \xi^*(\mathbf{x}' - \mathbf{x})] & U(\mathbf{x} - \mathbf{x}') [2n_0 + s^* + \sigma^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}')] \end{pmatrix} \\
 &\quad - \delta_{\alpha\alpha'} \frac{1}{\hbar} \begin{pmatrix} R(\mathbf{x} - \mathbf{x}') K(\mathbf{x} - \mathbf{x}', \tau - \tau') & R(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \Theta(\mathbf{x} - \mathbf{x}', \tau - \tau') \\ R(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \Theta^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}', \tau - \tau') & R(\mathbf{x} - \mathbf{x}') K^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}', \tau - \tau') \end{pmatrix} \\
 &\quad - \frac{1}{\hbar} \begin{pmatrix} R(\mathbf{x} - \mathbf{x}') [n_0 + \kappa(\mathbf{x} - \mathbf{x}')] & R(\mathbf{x} - \mathbf{x}') [n_0 + \theta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')] \\ R(\mathbf{x} - \mathbf{x}') [n_0 + \theta^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}')] & R(\mathbf{x} - \mathbf{x}') [n_0 + \kappa^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}')] \end{pmatrix}, \quad (5.99)
 \end{aligned}$$

wobei der Term proportional N hier bereits vernachlässigt wurde, da er im Replika-Limes ohnehin wegfällt. Führt man nun eine Fourier-Matsubara-Transformation wie in (4.61) durch, so erhält man die Fourier-Matsubara-Transformierte des Integralkerns, eine $2N \times 2N$ -Matrix, deren Form allerdings etwas anders ist als in (4.62). Sie lautet

$$G_{\alpha\alpha'}^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m) = \begin{pmatrix} a(\mathbf{k}, \omega_m) & d(\mathbf{k}, \omega_m) \\ \bar{d}(\mathbf{k}, \omega_m) & \bar{a}(\mathbf{k}, \omega_m) \end{pmatrix} \delta_{\alpha\alpha'} + \begin{pmatrix} b(\mathbf{k}, \omega_m) & c(\mathbf{k}, \omega_m) \\ \bar{c}(\mathbf{k}, \omega_m) & \bar{b}(\mathbf{k}, \omega_m) \end{pmatrix}. \quad (5.100)$$

Die Einträge sind also nicht mehr die komplex konjugierten voneinander. Statt dessen sind die Einträge lediglich recht ähnlich. Sie lauten

$$a(\mathbf{k}, \omega_m) = -i\hbar\omega_m + \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2M} + \hbar\mathbf{k}\mathbf{u} - \mu + \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} U(\mathbf{x}) [2n_0 + s + \sigma(\mathbf{x})] - \frac{1}{\hbar} \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x}) K_m(\mathbf{x}), \quad (5.101)$$

$$b(\mathbf{k}, \omega_m) = -\beta\delta_{m,0} \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x}) [n_0 + \kappa(\mathbf{x})], \quad (5.102)$$

$$c(\mathbf{k}, \omega_m) = -\beta\delta_{m,0} \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x}) [n_0 + \theta(\mathbf{x})], \quad (5.103)$$

$$d(\mathbf{k}, \omega_m) = \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} U(\mathbf{x}) [n_0 + \xi(\mathbf{x})] - \frac{1}{\hbar} \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x}) \Theta_m(\mathbf{x}), \quad (5.104)$$

$$\bar{a}(\mathbf{k}, \omega_m) = -i\hbar\omega_m + \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2M} - \hbar\mathbf{k}\mathbf{u} - \mu + \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} U(\mathbf{x}) [2n_0 + s^* + \sigma^*(\mathbf{x})] - \frac{1}{\hbar} \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x}) K_m^*(\mathbf{x}), \quad (5.105)$$

$$\bar{b}(\mathbf{k}, \omega_m) = -\beta\delta_{m,0} \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x}) [n_0 + \kappa^*(\mathbf{x})], \quad (5.106)$$

$$\bar{c}(\mathbf{k}, \omega_m) = -\beta\delta_{m,0} \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x}) [n_0 + \theta^*(\mathbf{x})], \quad (5.107)$$

$$\bar{d}(\mathbf{k}, \omega_m) = \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} U(\mathbf{x}) [n_0 + \xi^*(\mathbf{x})] - \frac{1}{\hbar} \int d^D x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x}) \Theta_m^*(\mathbf{x}). \quad (5.108)$$

Der Oberstrich soll daran erinnern, dass die das äußere Geschwindigkeitsfeld \mathbf{u} nun für jedes der Molekularfelder wichtig ist, da es in deren Bestimmungsgleichung zumindest implizit auftaucht. Die Sterne stehen folgerichtig auch nicht mehr für reine komplexe Konjugation. Statt dessen ist die Abhängigkeit von dem äußeren Geschwindigkeitsfeld auch hier wichtig. Da eine penible Trennung aber nur zusätzliche Notation einführt, und dies später ohnehin unwichtig wird, sei diese Ungenauigkeit hier gestattet. Da das effektive Potential berechnet werden muss, geht man nun analog zu Abschnitt 5.3 vor. Zur Vereinfachung der Notation wird ab jetzt wiederum angenommen, dass das Wechselwirkungspotential und die Unordnungskorrelation sehr schnell abfallen. Das Ergebnis für das effektive Potential im Replika-Limes $N \rightarrow 0$ lautet dann

$$V_{\text{eff}} = V_{\text{eff}}^{(0)} + V_{\text{eff}}^{(2)} \quad (5.109)$$

mit den Bezeichnungen

$$V_{\text{eff}}^{(0)} = V \left\{ -\mu n_0 + \frac{1}{2} U(\mathbf{k} = \mathbf{0}) [n_0^2 - \xi\xi^* - ss^* - \sigma\sigma^*] + \frac{1}{2} R(\mathbf{k} = \mathbf{0}) \left[\frac{1}{\hbar} K_0 \kappa^* + \frac{1}{\hbar} K_0^* \kappa + \frac{1}{\beta\hbar^2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} K_m K_{-m}^* + \frac{1}{\hbar} \Theta_0 \theta^* + \frac{1}{\hbar} \Theta_0^* \theta + \frac{1}{\beta\hbar^2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \Theta_m \Theta_{-m}^* \right] \right\} \quad (5.110)$$

und

$$V_{\text{eff}}^{(2)} = \lim_{N \rightarrow 0} \frac{1}{2\beta N} \text{Tr} \ln G^{-1} = \lim_{N \rightarrow 0} \frac{V}{2\beta N} \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \ln [\text{Det} G^{-1}(\mathbf{k}, \omega_m)] = \frac{V}{2\beta} \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left\{ \ln(a\bar{a} - d\bar{d}) + \frac{b\bar{a} + a\bar{b} - c\bar{d} - \bar{c}d}{a\bar{a} - d\bar{d}} \right\}. \quad (5.111)$$

Da hier keine Berechnung des effektiven Potentials erfolgen soll, wird die Normalordnung der Operatoren nicht durch Mitnahme eines Zeitordnungsterms berücksichtigt. Nach Wiedereinsetzen der Abkürzungen erhält man

$$\begin{aligned}
 V_{\text{eff}}^{(2)} = & \frac{V}{2\beta} \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left\{ \sum_{m=-\infty}^{\infty} \ln \left[\left(-i\hbar\omega_m + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} + \hbar \mathbf{k} \mathbf{u} - \mu + U(\mathbf{k})(2n_0 + s + \sigma) - \frac{1}{\hbar} R(\mathbf{k}) K_m \right) \right. \right. \\
 & \times \left(i\hbar\omega_m + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \hbar \mathbf{k} \mathbf{u} - \mu + U(\mathbf{k})(2n_0 + s^* + \sigma^*) - \frac{1}{\hbar} R(\mathbf{k}) K_m^* \right) \\
 & - \left(U(\mathbf{k})[n_0 + \xi] - \frac{1}{\hbar} R(\mathbf{k}) \Theta_m \right) \left(U(\mathbf{k})[n_0 + \xi^*] - \frac{1}{\hbar} R(\mathbf{k}) \Theta_m^* \right) \left. \right] \\
 & - \beta R(\mathbf{k})[n_0 + \kappa] \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \hbar \mathbf{k} \mathbf{u} - \mu + U(\mathbf{k})(2n_0 + s^* + \sigma^*) - \frac{1}{\hbar} R(\mathbf{k}) K_0^* \right) \cdots \\
 & + \frac{\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} + \hbar \mathbf{k} \mathbf{u} - \mu + U(\mathbf{k})(2n_0 + s + \sigma) - \frac{1}{\hbar} R(\mathbf{k}) K_0 \right) \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \hbar \mathbf{k} \mathbf{u} - \mu + U(\mathbf{k})(2n_0 + s^* + \sigma^*) - \frac{1}{\hbar} R(\mathbf{k}) K_0^* \right) \cdots}{\cdots - \beta R(\mathbf{k})[n_0 + \kappa^*] \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} + \hbar \mathbf{k} \mathbf{u} - \mu + U(\mathbf{k})(2n_0 + s + \sigma) - \frac{1}{\hbar} R(\mathbf{k}) K_0 \right)} \\
 & \cdots - \frac{\left(U(\mathbf{k})[n_0 + \xi] - \frac{1}{\hbar} R(\mathbf{k}) \Theta_0 \right) \left(U(\mathbf{k})[n_0 + \xi^*] - \frac{1}{\hbar} R(\mathbf{k}) \Theta_0^* \right)}{\beta R(\mathbf{k})[n_0 + \theta] \left(U(\mathbf{k})[n_0 + \xi^*] - \frac{1}{\hbar} R(\mathbf{k}) \Theta_0^* \right) \cdots} \\
 & + \frac{\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} + \hbar \mathbf{k} \mathbf{u} - \mu + U(\mathbf{k})(2n_0 + s + \sigma) - \frac{1}{\hbar} R(\mathbf{k}) K_0 \right) \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \hbar \mathbf{k} \mathbf{u} - \mu + U(\mathbf{k})(2n_0 + s^* + \sigma^*) - \frac{1}{\hbar} R(\mathbf{k}) K_0^* \right) \cdots}{\cdots + \beta R(\mathbf{k})[n_0 + \theta^*] \left(U(\mathbf{k})[n_0 + \xi] - \frac{1}{\hbar} R(\mathbf{k}) \Theta_0 \right)} \\
 & \left. \cdots - \frac{\left(U(\mathbf{k})[n_0 + \xi] - \frac{1}{\hbar} R(\mathbf{k}) \Theta_0 \right) \left(U(\mathbf{k})[n_0 + \xi^*] - \frac{1}{\hbar} R(\mathbf{k}) \Theta_0^* \right)}{\cdots} \right\}. \tag{5.112}
 \end{aligned}$$

Da man nun durch Extremalisierung nach den Feldern die Feldgleichungen erhält (vgl. Herleitung der Wirkung in Abschnitt 4.1), ist nur die explizite Abhängigkeit der $a, b, c, d, \bar{a}, \bar{b}, \bar{c}, \bar{d}$ von \mathbf{u} für die Berechnung der normalfluiden Dichte von Interesse. Man macht nun eine Taylorentwicklung dieser Abhängigkeit nach \mathbf{u} bis zur zweiten Ordnung. Dabei hat lediglich $V_{\text{eff}}^{(2)}$ eine explizite Abhängigkeit von \mathbf{u} . Da man entwickelt, verschwinden die Abhängigkeiten der Felder von \mathbf{u} in den einzelnen Ordnungen. Damit (und mit passender Phasenwahl) gelten die bereits aus Kapitel 4 bekannten Zusammenhänge

$$\begin{aligned}
 \kappa &= \kappa^*, \\
 \theta &= \theta^*, \\
 K_m &= K_{-m}^*, \\
 \Theta_m &= \Theta_{-m}^*, \\
 \xi &= \xi^*, \\
 s &= s^* = n - n_0, \\
 \sigma &= \sigma^* = n - n_0.
 \end{aligned} \tag{5.113}$$

Die Verwendung der nachlässigen Schreibweise für die Felder bei Berücksichtigung des äußeren Geschwindigkeitsfeldes \mathbf{u} wird an dieser Stelle also nachträglich gerechtfertigt. Im Falle gebrochener Symmetrie gilt zusätzlich

$$\kappa = \theta. \tag{5.114}$$

Die Fälle $\kappa = \theta$ und $\theta = 0$ lassen sich allerdings zusammenfassen, denn wenn θ verschwindet, so verschwindet auch ξ , und beide können nur für $n_0 = 0$ verschwinden. Die Fälle unterscheiden sich dann lediglich im Nenner der Summanden in (5.112). Die Entwicklung lautet dann formal gesehen

$$V_{\text{eff}} = V_{\text{eff}}^{(0)} \Big|_{\mathbf{u}=\mathbf{0}} + V_{\text{eff}}^{(2)} \Big|_{\mathbf{u}=\mathbf{0}} + \nabla_{\mathbf{u}} V_{\text{eff}}^{(2)} \Big|_{\mathbf{u}=\mathbf{0}} \cdot \mathbf{u} + \frac{1}{2} \Delta V_{\text{eff}} + \cdots. \tag{5.115}$$

Dabei dient ΔV_{eff} als Abkürzung:

$$\sum_{i,j} \frac{\partial^2}{\partial u_i \partial u_j} V_{\text{eff}}^{(2)} \Big|_{\mathbf{u}=\mathbf{0}} u_i u_j. \tag{5.116}$$

Die erste Ordnung der Entwicklung liefert aus Symmetriegründen keinen Beitrag:

$$\nabla_{\mathbf{u}} V_{\text{eff}}^{(2)} \Big|_{\mathbf{u}=\mathbf{0}} = \mathbf{0}. \quad (5.117)$$

Die zweite Ordnung der Entwicklung liefert aber unter Ausnutzung der Symmetrie bezüglich der k_i , also unter Benutzung von

$$\int d^D k k_i k_j f(|\mathbf{k}|) = \delta_{ij} \frac{1}{D} \int d^D k \mathbf{k}^2 f(|\mathbf{k}|), \quad (5.118)$$

das Ergebnis

$$\begin{aligned} \Delta V_{\text{eff}} = & \frac{2MV}{\beta D} \mathbf{u}^2 \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} \\ & \left\{ \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left[\frac{1}{\left| i\hbar\omega_m + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2U(\mathbf{k})n - \frac{R(\mathbf{k})}{\hbar} K_m^* \right|^2 - \left| U(\mathbf{k})[n_0 + \xi] - \frac{R(\mathbf{k})}{\hbar} \Theta_m \right|^2} \right. \right. \\ & + \frac{2\hbar^2 \omega_m^2}{\left(\left| i\hbar\omega_m + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2U(\mathbf{k})n - \frac{R(\mathbf{k})}{\hbar} K_m^* \right|^2 - \left| U(\mathbf{k})[n_0 + \xi] - \frac{R(\mathbf{k})}{\hbar} \Theta_m \right|^2 \right)^2} \\ & - \frac{2R(\mathbf{k})\beta[n_0 + \kappa]}{\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2U(\mathbf{k})n - \frac{R(\mathbf{k})}{\hbar} K_0 - U(\mathbf{k})[n_0 + \xi] + \frac{R(\mathbf{k})}{\hbar} \Theta_0 \right)} \\ & \left. \times \frac{1}{\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2U(\mathbf{k})n - \frac{R(\mathbf{k})}{\hbar} K_0 + U(\mathbf{k})[n_0 + \xi] - \frac{R(\mathbf{k})}{\hbar} \Theta_0 \right)^2} \right\}. \quad (5.119) \end{aligned}$$

Mit Hilfe der Zusammenhänge zwischen Ω , Systemimpuls \mathbf{p} und \mathbf{u} , gegeben durch (5.94) und (5.95), bekommt man so die normalfluide Dichte:

$$\begin{aligned} n_n = & \frac{2}{\beta D} \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} \left\{ \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{i\omega_m \eta} \right. \\ & \left[\frac{1}{\left| i\hbar\omega_m + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2U(\mathbf{k})n - \frac{R(\mathbf{k})}{\hbar} K_m^* \right|^2 - \left| U(\mathbf{k})[n_0 + \xi] - \frac{R(\mathbf{k})}{\hbar} \Theta_m \right|^2} \right. \\ & - \frac{2\hbar^2 \omega_m^2}{\left(\left| i\hbar\omega_m + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2U(\mathbf{k})n - \frac{R(\mathbf{k})}{\hbar} K_m^* \right|^2 - \left| U(\mathbf{k})[n_0 + \xi] - \frac{R(\mathbf{k})}{\hbar} \Theta_m \right|^2 \right)^2} \\ & + \frac{2R(\mathbf{k})\beta[n_0 + \kappa]}{\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2U(\mathbf{k})n - \frac{R(\mathbf{k})}{\hbar} K_0 - U(\mathbf{k})[n_0 + \xi] + \frac{R(\mathbf{k})}{\hbar} \Theta_0 \right)} \\ & \left. \times \frac{1}{\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2U(\mathbf{k})n - \frac{R(\mathbf{k})}{\hbar} K_0 + U(\mathbf{k})[n_0 + \xi] - \frac{R(\mathbf{k})}{\hbar} \Theta_0 \right)^2} \right\}. \quad (5.120) \end{aligned}$$

Hier nun wurde die Normalordnung der Operatoren wieder explizit berücksichtigt, da die normalfluide Dichte nun berechnet werden soll.

5.8.1 Näherung in Analogie zur T-Matrix

An dieser Stelle müssen nun Näherungen eingeführt werden, da die K_m nicht explizit zu einem verwendbaren Ausdruck berechenbar sind. Es wird hier die noch recht etablierte Näherung in Analogie zur T-Matrix (Abschnitt 5.7.1) gemacht, die in niedrigster Ordnung das Huang-Meng-Resultat reproduziert. Zur Vereinfachung nimmt man gleichzeitig an, dass man lokale Wechselwirkung und ein unkorreliertes Zufallspotential hat. Man erhält dann

$$n_n = \frac{2}{\beta D} \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} \left\{ \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{i\omega_m \eta} \left[\frac{1}{\hbar^2 \omega_m^2 + \left| \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn \right|^2 - |gn_0|^2} - \frac{2\hbar^2 \omega_m^2}{\left(\hbar^2 \omega_m^2 + \left| \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn \right|^2 - |gn_0|^2 \right)^2} \right] + \frac{2R\beta[n_0 + \kappa]}{\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn - gn_0 \right) \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn + gn_0 \right)^2} \right\}. \quad (5.121)$$

Mittels (A.7) behandelt man die m -Summe. Zusätzlich folgt die Substitution (5.38).

$$n_n = \frac{2}{\beta D} \left(\frac{M}{2\pi \hbar^2} \right)^{D/2} \frac{1}{\Gamma(D/2)} \int_0^\infty d\epsilon \epsilon^{D/2} \left\{ \frac{\hbar\beta}{2\pi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\omega(\eta - n\hbar\beta)} \left[\frac{1}{\hbar^2 \omega^2 + |\epsilon - \mu + 2gn|^2 - |gn_0|^2} - \frac{2\hbar^2 \omega^2}{\left(\hbar^2 \omega^2 + |\epsilon - \mu + 2gn|^2 - |gn_0|^2 \right)^2} \right] + \frac{2R\beta[n_0 + \kappa]}{(\epsilon - \mu + 2gn - gn_0)(\epsilon - \mu + 2gn + gn_0)^2} \right\}. \quad (5.122)$$

Der Residuensatz erlaubt die Berechnung des ω -Integrals. Man erhält

$$n_n = \frac{2}{D} \left(\frac{M}{2\pi \hbar^2} \right)^{D/2} \frac{1}{\Gamma(D/2)} \int_0^\infty d\epsilon \epsilon^{D/2} \left\{ \beta \frac{e^{\beta\sqrt{(\epsilon - \mu + 2gn)^2 - g^2 n_0^2}}}{\left(e^{\beta\sqrt{(\epsilon - \mu + 2gn)^2 - g^2 n_0^2}} - 1 \right)^2} + \frac{2R[n_0 + \kappa]}{(\epsilon - \mu + 2gn - gn_0)(\epsilon - \mu + 2gn + gn_0)^2} \right\}. \quad (5.123)$$

Möchte man statt dieser Näherung die in Abschnitt 5.7.3 genannte Näherung für tiefe Temperaturen machen, so führt die Substitution

$$\mu \rightarrow \mu + \frac{R}{\hbar} K_0 \quad (5.124)$$

zum richtigen Ergebnis für diese Tieftemperaturnäherung. In beiden Fällen besteht die normalfluide Dichte dann in der Kondensatphase aus einem unordnungsunabhängigen Term und einem unordnungsabhängigen Term. Benutzung der Gross-Pitaevskii-Gleichung (4.82), sowohl in der Näherung in Analogie zur T-Matrix aus Abschnitt 5.7.1 als auch in der Tieftemperaturnäherung aus Abschnitt 5.7.3, liefert das Ergebnis

$$n_n = \frac{2}{D} \left(\frac{M}{2\pi \hbar^2} \right)^{D/2} \frac{1}{\Gamma(D/2)} \int_0^\infty d\epsilon \epsilon^{D/2} \left\{ \beta \frac{e^{\beta\sqrt{\epsilon^2 + 2gn_0\epsilon}}}{\left(e^{\beta\sqrt{\epsilon^2 + 2gn_0\epsilon}} - 1 \right)^2} + \frac{2R[n_0 + \kappa]}{\epsilon(\epsilon + 2gn_0)^2} \right\}. \quad (5.125)$$

Ein wenig kann diese Gleichung noch vereinfacht werden, indem man das Integral ausführt, so weit es möglich ist. In $D = 3$ Dimensionen folgt:

$$n_n = \frac{2}{3} \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{1}{\Gamma(3/2)} \int_0^\infty d\epsilon \epsilon^{3/2} \beta \frac{e^{\beta\sqrt{\epsilon^2+2gn_0\epsilon}}}{\left(e^{\beta\sqrt{\epsilon^2+2gn_0\epsilon}} - 1 \right)^2} + \frac{4}{3} \frac{RM^2}{8\hbar^4\pi^{3/2}} \frac{[n_0 + \kappa]}{\sqrt{a_s n_0}}. \quad (5.126)$$

Eine weitere analytische Behandlung dieses Integrals kann nur in einem Grenzfall erfolgen. Der Fall $T = 0$ bei sehr kleiner Wechselwirkung soll in Abschnitt 5.10 behandelt werden. Trotzdem kann man erkennen, dass der unordnungsabhängige Term den bekannten Faktor $4/3$ mal der Entleerung des Grundzustandes liefert [18], also

$$n_s = n - \Delta n_s \Big|_{R=0} - \frac{4}{3} \Delta n_0 \Big|_{\text{Unordnung}}, \quad (5.127)$$

mit der Entleerung des Grundzustandes

$$\Delta n_0 \Big|_{\text{Unordnung}} = \frac{RM^2}{8\hbar^4\pi^{3/2}} \frac{[n_0 + \kappa]}{\sqrt{a_s n_0}}. \quad (5.128)$$

Für $\kappa = 0$ erhält man das Huang-Meng-Ergebnis (5.69), für ein nicht genähertes κ sogar ein erweitertes Ergebnis, dessen Analogon für die Entleerung der Kondensatdichte in Abschnitt 5.6 als Erweiterung des Huang-Meng-Resultats vorgestellt wurde. In beiden Fällen hat man bei der Entleerung der superfluiden Dichte also einen zusätzlichen Faktor vor der Entleerung des Grundzustandes, welcher gleich ist. Es ist also in Analogie zum Resultat von Huang und Meng auch hier möglich, dass die superfluide Dichte verschwindet, während die Kondensatdichte noch von Null verschieden ist. Die Interpretation bleibt dieselbe: Es entstehen lokale Kondensate, die aber durch die Unordnung nicht zur superfluiden Dichte beitragen. Man kann von Lokalisierung sprechen.

5.8.2 Superfluide Dichte in Popov-Näherung ohne Unordnung

Da die Gleichungen für die superfluide Dichte nun hergeleitet wurden, kann man die Popov-Näherung ohne Unordnung auf sie anwenden, welche in Abschnitt 5.4 behandelt wurde. Dazu startet man mit der allgemeinen Gleichung für die normalfluide Dichte (5.120), setzt aber $R = 0$ und wendet die Popov-Näherung $\xi = 0$ an. Außerdem wird erneut von lokaler Wechselwirkung ausgegangen, sodass $U(\mathbf{k}) \equiv g$ angenommen wird. Die Berechnung der m -Summe geschieht dann völlig analog zu der Berechnung in Abschnitt 5.8.1, was zu erwarten war, da diese Näherung eine Erweiterung der Popov-Theorie für Unordnung darstellt. Das Ergebnis für die superfluide Dichte lautet daher in $D = 3$ Dimensionen

$$n_s = n - \frac{2}{3} \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{1}{\Gamma(3/2)} \int_0^\infty d\epsilon \epsilon^{3/2} \beta \frac{e^{\beta\sqrt{\epsilon^2+2gn_0\epsilon}}}{\left(e^{\beta\sqrt{\epsilon^2+2gn_0\epsilon}} - 1 \right)^2}. \quad (5.129)$$

Die Substitution $\tilde{\epsilon} = \beta\epsilon$ bei anschließender Verwendung der dimensionslosen Einheiten, die in der Popov-Näherung verwendet wurden (5.54), führt auf die Gleichung

$$\frac{n_s}{n} = 1 - \frac{32}{3\sqrt{\pi}} \tilde{t}^{3/2} \int_0^\infty d\epsilon \epsilon^{3/2} \frac{e^{\sqrt{\epsilon^2 + \frac{\tilde{a}_s \tilde{n}_0}{\tilde{t}} \epsilon}}}{\left(e^{\sqrt{\epsilon^2 + \frac{\tilde{a}_s \tilde{n}_0}{\tilde{t}} \epsilon}} - 1 \right)^2}. \quad (5.130)$$

Berücksichtigt man die Stabilitätsdiskussion aus Abschnitt 5.4.2, so ist eindeutig, welcher Wert für die dimensionslose Kondensatdichte \tilde{n}_0 einzusetzen ist. Nimmt man nun als Beispielgas Rubidium-87, wie in Abschnitt 5.4.1, so folgt wiederum $\tilde{a}_s = 0,026$. Die superfluide Dichte ist, zusammen mit der zu ihr gehörigen Kondensatdichte, in Abbildung 5.3 über der dimensionslosen Temperatur \tilde{t} aufgetragen. Man sieht, dass die superfluide Dichte in dieser Näherung für jede beliebige Temperatur größer ist als die zugehörige Kondensatdichte.

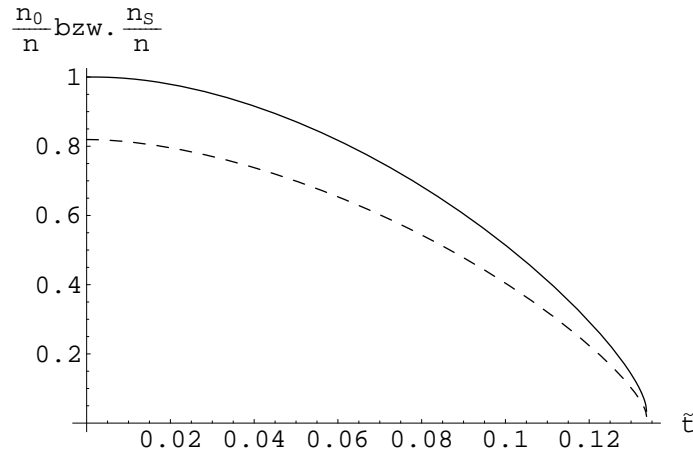


Abbildung 5.3: Popov-Näherung: Normierte superfluide Dichte n_s/n (durchgezogene Linie) und normierte Kondensatdichte n_0/n (gestrichelte Linie) von ^{87}Rb über der dimensionslosen Temperatur \tilde{t} aufgetragen. Die superfluide Dichte ist stets größer als die Kondensatdichte.

5.9 Gasphase und Unordnungsphase

Nach Behandlung von Kondensatphase und superfluider Dichte ist es interessant zu wissen, welche Eigenschaften die Gasphase und eine durch die Unordnung geprägte Phase haben. Beide Phasen sind durch $n_0 = 0$ festgelegt. Die Gasphase hat im Fall ohne Unordnung die Eigenschaft, dass die anormalen Korrelationen verschwinden, da sie keine gebrochene Symmetrie aufweist. Bei der Unordnungsphase ist bisher nicht eindeutig, ob die anormalen Korrelationen verschwinden. Ein Argument gegen das Verschwinden liefern Nozieres und Saint James mit der Paarkondensation bei genügend attraktiver Wechselwirkung [24]. Wie ein Vergleich der Wirkungen (4.26) und (4.27) zeigt, kann man die Unordnung im Prinzip als effektive attraktive Wechselwirkung auffassen. Bei genügend starker Unordnung kann es also zu Paarkondensation kommen, womit die anormalen Korrelationen nicht verschwinden. Eine Behandlung des Falles, wo man auf alle anormalen Korrelationen von vorneherein verzichtet, findet sich in [25]. Man beachte, dass dort in der Kondensatphase für $T = 0$ Probleme auftauchen, da die Annahme des Verschwindens der anormalen Korrelationen dort nicht haltbar ist.

Hier soll nun angenommen werden, dass die anormalen Korrelationen verschwinden, man sich also nicht in einer Phase gebrochener Symmetrie befindet. Es folgt damit

$$\begin{aligned}\xi &= 0, \\ \Theta_m &= 0.\end{aligned}\tag{5.131}$$

Damit bleiben als Gleichungen für die Nicht-Kondensatphasen bei Annahme des Verschwindens anormaler Korrelationen die Teilchenzahlgleichung, die sich aus (4.95) ableiten lässt,

$$\begin{aligned}n &= \lim_{\eta \searrow 0} \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{i\omega_m \eta} \frac{1}{\beta[-i\omega_m + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2U(\mathbf{k})n - \frac{R(\mathbf{k})}{\hbar} K_m]} \\ &+ \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{R(\mathbf{k})\kappa}{\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2U(\mathbf{k})n - \frac{R(\mathbf{k})}{\hbar} K_0\right)^2}\end{aligned}\tag{5.132}$$

die Gleichung für die K_m , die man aus (4.88) ableitet

$$\frac{K_m}{\hbar} = \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{1}{-i\omega_m + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2U(\mathbf{k})n - \frac{R(\mathbf{k})}{\hbar} K_m},\tag{5.133}$$

sowie die Gleichung für κ , die man aus (4.94) erhält,

$$\kappa = \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{R(\mathbf{k})\kappa}{\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2U(\mathbf{k})n - \frac{R(\mathbf{k})}{\hbar} K_0\right)^2}. \quad (5.134)$$

Im Falle lokaler Wechselwirkung und räumlich unkorrelierter Unordnung kann man die Integrale ausführen. Man erhält in $D = 3$ Dimensionen für die K_m nach (D.5)

$$\frac{K_m}{\hbar} = -2\sqrt{\pi} \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{-i\hbar\omega_m - \mu + 2gn - \frac{R}{\hbar} K_m}. \quad (5.135)$$

Die Lösung dieser quadratischen Gleichung lautet

$$K_m = -2\pi\hbar R \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2}\right)^3 - 2\sqrt{\pi}\hbar \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{-i\hbar\omega_m - \mu + 2gn + R^2\pi \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2}\right)^3}. \quad (5.136)$$

Sie ist eindeutig. Für κ folgt

$$\kappa = \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} R\kappa\sqrt{\pi} \frac{1}{\sqrt{2gn - \mu - \frac{R}{\hbar} K_0}}. \quad (5.137)$$

Es ergeben sich also dieselben Gleichungen wie in der Arbeit von Robert Graham und Axel Pelster [25]. Die weitere Diskussion ist dieser Arbeit zu entnehmen. Es soll eine kurze Zusammenfassung der wichtigsten Ergebnisse geliefert werden: Es existieren eine Gasphase, und es existiert eine neue Phase, die Glasphase. Die Gasphase ist definiert durch $\kappa = 0$, in der Glasphase verschwindet dieser Parameter, der nach Addition von n_0 neu eingeführte Ordnungsparameter für das Bose-Glas, nicht. Betrachtet man die Abhängigkeit der Teilchendichte vom chemischen Potential, so befindet man sich für feste Temperatur unterhalb eines kritischen chemischen Potentials stets in der Gasphase. Oberhalb dieses Potentials befindet man sich entweder in der Kondensatphase, oder in der Glasphase. In welche Phase das System übergeht, hängt hierbei von der Stärke der Unordnung ab.

Hierbei ist zu beachten, dass nicht klar ist, ob die Annahme, dass die anormalen Korrelationen verschwinden, in der Glasphase berechtigt ist.

5.10 Theorie für $T=0$ bei sehr schwacher Wechselwirkung

Zuletzt soll der Spezialfall $T = 0$ bei sehr schwacher Wechselwirkung betrachtet werden. Hierzu geht man von den in Abschnitt 5.7.4 hergeleiteten Gleichungen aus. Mit derselben Philosophie in der Näherung kann man nun auch die superfluide Dichte berechnen. Hierzu beachte man insbesondere die Gleichung für die normalfluide Dichte (5.120), erinnere sich aber daran, dass der Term, in dem die Temperatur explizit auftaucht, vernachlässigt werden muss, um konsistent zu den Gleichungen in Abschnitt 5.7.4 zu sein. Das Ergebnis lautet in $D = 3$ Dimensionen

$$n_s = n - \frac{4}{3} \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \frac{1}{\Gamma(3/2)} \int_0^\infty d\epsilon \epsilon^{3/2} \times \frac{R(\mathbf{k})n}{(\epsilon - \mu + 2U(\mathbf{k})n - U(\mathbf{k})[n_0 + \xi]) (\epsilon - \mu + 2U(\mathbf{k})n + U(\mathbf{k})[n_0 + \xi])^2}, \quad (5.138)$$

wobei insbesondere benutzt wurde, dass hier $\kappa = n - n_0$ gilt. Man nimmt an, dass Wechselwirkung und Unordnungskorrelation lokal sind. Damit gilt wie gehabt

$$\begin{aligned} U(\mathbf{k}) &\equiv g = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{M}, \\ R(\mathbf{k}) &\equiv R. \end{aligned} \quad (5.139)$$

Es fällt auf, dass die entstehenden Gleichungen nicht mit denen der Langevin-Theorie, welche von Patrick Navez entwickelt wurde, übereinstimmen [49]. Vom Standpunkt der in dieser Arbeit entwickelten Theorie aus sind seine Gleichungen inkonsistent, da er in der Gross-Pitaevskii-Gleichung Terme proportional R mitnimmt, aber in den Nennern der Teilchendichtegleichung nicht. Auch das Problem des Überzählens wird in seiner Arbeit nicht berücksichtigt.

Mittels Substitution (5.38) und dimensionaler Regularisierung (D.5) wird das aus der Teilchendichtegleichung (5.90) entstehende Integral dann gelöst, wobei man die Fälle $\theta = \kappa$ und $\theta = 0$ sofort zusammenfassen kann. Für die Teilchendichte ergibt sich

$$n = n_0 + \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\pi} \frac{Rn}{\sqrt{2gn - \mu + g[n_0 + \xi]}}. \quad (5.140)$$

Wenn diese Gleichung zur Bestimmung der Kondensatdichte dient, wird sofort die Gross-Pitaevskii-Gleichung (5.91) verwendet. Damit folgt

$$n = n_0 + \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\pi} \frac{Rn}{\sqrt{2gn_0}}. \quad (5.141)$$

Dies ist unabhängig davon, ob die anormalen Korrelationen mitgenommen werden, wie es Gleichung (4.96) vermuten ließe, oder ob das physikalische Argument eines bandlückenfreien Spektrums verwendet wird (5.83), und damit ξ vernachlässigt. Um zu bestimmen, welche der entstehenden Lösungen dieser Gleichung stabil und welche instabil sind, ist noch die Freie Energie zu betrachten. Sie ergibt sich aus dem effektiven Potential mit (5.15) und (5.28) bei Berücksichtigung der Tatsache, dass auf Grund der hier gemachten Näherungen die m -Summe wegfällt. Man erhält damit

$$F(n) = V \left\{ \mu(n - n_0) + g \left[\frac{1}{2}n_0^2 - \frac{1}{2}\xi^2 - (n - n_0)^2 \right] - \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{Rn \left[\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn \right] - R(n_0 + \theta)g(n_0 + \xi)}{\left| \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} - \mu + 2gn \right|^2 - |g(n_0 + \xi)|^2} \right\}, \quad (5.142)$$

wobei zu berücksichtigen ist, dass alle Felder sowie das chemische Potential durch die Teilchendichte n ausgedrückt werden müssen, da dies die natürliche Variable der Freien Energie ist. Daher sind die jeweiligen Gleichungen für ξ , n_0 , θ und μ zu lösen, und diese Lösung muss in den obigen Ausdruck eingesetzt werden, damit man die Freie Energie erhält. In einer Phase gebrochener Symmetrie, insbesondere also in der Kondensatphase, ist $\theta = \kappa$, sonst ist $\theta = 0$, und die anormalen Korrelationen verschwinden. Diese beiden Fälle kann man zusammenfassen, und erhält nach Substitution (5.38) in $D = 3$ Dimensionen somit die Gleichung

$$F(n) = V \left\{ \mu(n - n_0) + g \left[\frac{1}{2}n_0^2 - \frac{1}{2}\xi^2 - (n - n_0)^2 \right] - \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty d\epsilon \sqrt{\epsilon} \frac{Rn}{(\epsilon - \mu + 2gn + g(n_0 + \xi))} \right\}. \quad (5.143)$$

Dieses Integral ist eigentlich divergent. Unter dem Integral ist allerdings ein konstanter Term $1/\sqrt{\epsilon}$ abzuziehen, der die Divergenz weghebt, und, da er konstant ist, nicht in physikalischen Größen wie zum Beispiel der Teilchendichte auftaucht. Dies entspricht einer Verschiebung des Energienullpunktes. Macht man dies, so kann man das Integral berechnen, und das Ergebnis lautet

$$F(n) = V \left\{ \mu(n - n_0) + g \left[\frac{1}{2}n_0^2 - \frac{1}{2}\xi^2 - (n - n_0)^2 \right] + \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} 2\sqrt{\pi} Rn \sqrt{2gn - \mu + g(n_0 + \xi)} \right\}. \quad (5.144)$$

Im Folgenden muss man aber die Fallunterscheidung treffen, welche der Forderungen (Bandlückenfreiheit oder hergeleitete Gleichungen) als die physikalische angenommen wird. Vorher werden für beide Fälle aber gemeinsame Einheiten gewählt:

$$\begin{aligned}
 \tilde{R} &= \frac{M^2}{8\pi^{3/2}\hbar^4 n^{1/3}} R, \\
 \tilde{\mu} &= \frac{M}{8\pi\hbar^2 n^{2/3}} \mu, \\
 \tilde{a}_s &= a_s n^{1/3}, \\
 \tilde{F} &= \frac{M}{8\pi\hbar^2 V n^{5/3}} \\
 \tilde{n}_0 &= \frac{n_0}{n}, \\
 \tilde{n}_s &= \frac{n_s}{n}.
 \end{aligned} \tag{5.145}$$

sowie

$$\begin{aligned}
 \bar{R} &= \frac{M^2}{8\pi^{3/2}\hbar^4} R, \\
 \bar{\mu} &= \frac{M}{8\pi\hbar^2} \mu.
 \end{aligned} \tag{5.146}$$

Die Einheiten in (5.145) sind dimensionslos, die in (5.146) sind es nicht, lassen aber zu, dass man explizite Abhängigkeiten von der Teilchendichte erkennen kann. Mit Hilfe dieser Einheiten kann man nun die normierte Kondensatdichte und die normierte superfluide Dichte (jeweils mit (5.145)) und die Teilchendichte in Abhängigkeit vom chemischen Potential (mittels (5.146)) berechnen.

5.10.1 Bandlückenfreies Spektrum

In diesem Abschnitt wird angenommen, dass die hergeleitete Gleichung für ξ in (4.96) auf Grund des Widerspruchs zur Forderung nach einem bandlückenfreien Spektrum (5.83) ignoriert werden muss. Statt dessen gilt in diesem Abschnitt

$$\xi = 0. \tag{5.147}$$

Damit tauchen keine anormalen Korrelationen auf, wenn die Kondensatdichte verschwindet. Die superfluide Dichte (5.138) braucht nur in der Kondensatphase berechnet werden. Das Ergebnis lautet unter Benutzung von der Gross-Pitaevskii-Gleichung (5.91)

$$n_s = n - \frac{4}{3} \frac{RM^2}{8\pi^{3/2}\hbar^4} \frac{n}{\sqrt{a_s n_0}} \tag{5.148}$$

Zur Bestimmung des chemischen Potentials benutzt man zum einen die Gross-Pitaevskii-Gleichung, die in der Kondensatphase mit den hier verwendeten Annahmen lautet

$$[-\mu + 2gn - gn_0]\sqrt{n_0} = 0. \tag{5.149}$$

Diese legt das chemische Potential in der Kondensatphase fest. Die Unordnung taucht hier nur implizit in der Kondensatdichte auf. Man benötigt man noch eine weitere Gleichung zur Bestimmung des chemischen Potentials in der Nichtkondensatphase, die man durch Integration der Teilchendichtegleichung (5.85) bei Beachtung der verwendeten Näherungen erhält. Insbesondere verschwinden die anormalen Korrelationen in dieser Phase, d.h. $\xi = 0$, $\theta = 0$. Die Gleichung lautet

$$n = \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\pi} \frac{Rn}{\sqrt{2gn - \mu}}. \tag{5.150}$$

Kondensatphase

Die normierte Kondensatdichte ist nach (5.141)

$$\tilde{n}_0 = 1 - \frac{\tilde{R}}{\sqrt{\tilde{a}_s \tilde{n}_0}}. \quad (5.151)$$

Wie man sieht, gibt es für die Kondensatdichte im Prinzip 3 Lösungen. Um zu entscheiden, welcher der stabile Zweig ist, überlegt man sich zunächst, dass die normierte Kondensatdichte nicht größer als 1 werden kann. Damit entfällt bereits eine der Lösungen. Um die Stabilität für die beiden anderen Fälle unterscheiden zu können, betrachtet man die Freie Energie (5.144). In normierten Einheiten, und mit den hier verwendeten Annahmen, lautet sie in der Kondensatphase

$$\frac{\tilde{F}}{\tilde{a}_s} = \left(1 - \frac{1}{2}\tilde{n}_0\right) \left(1 - \tilde{n}_0\right) + \frac{1}{2} \left[\frac{1}{2}\tilde{n}_0^2 - (1 - \tilde{n}_0)^2\right] + 2\frac{\tilde{R}}{\sqrt{\tilde{a}_s}}\sqrt{\tilde{n}_0}. \quad (5.152)$$

Hier ist zu berücksichtigen, dass n_0 durch die Extremalisierung der Freien Energie bestimmt werden muss, was äquivalent zur Gleichung für die Kondensatdichte (5.151) sein sollte. Extremalisierung der Freien Energie bezüglich der Kondensatdichte führt aber auf die Gleichung

$$\tilde{n}_0 = 1 - 2\frac{\tilde{R}}{\sqrt{\tilde{a}_s \tilde{n}_0}}. \quad (5.153)$$

Dass diese Gleichung für die Kondensatdichte nicht Gleichung (5.151) entspricht, ist allerdings keine Überraschung, da man die hergeleitete Gleichung für ξ in (4.96) vernachlässigt hat, und die Erhaltung der Teilchendichte damit nicht mehr gewährleistet ist. Es ist daher nicht klar, wie die korrekte Freie Energie aussieht. Insbesondere führt dies dazu, dass keine belastbaren Stabilitätsaussagen gemacht werden können.

Man kann aber die plausible Annahme machen, dass der physikalische Zweig derjenige ist, welcher für $R \rightarrow 0$ den Grenzwert $n_0 \rightarrow n$ ergibt, und gleichzeitig die normierte Kondensatdichte nicht größer als 1 werden lässt. Damit ist die Lösung eindeutig. Das Ergebnis für die Kondensatdichte ist in Grafik 5.4 aufgetragen, und ist nicht davon abhängig, ob man die Annahme der Bandlückenfreiheit macht oder nicht, wohl aber die Stelle des Phasenübergangs. Der Huang-Meng-Fall ist gestrichelt eingetragen. Die anderen Kondensatzweige sind unphysikalisch oder instabil, und nicht eingezeichnet. Die Kondensatdichte geht bei einem Wert von $\tilde{R}/\sqrt{\tilde{a}_s} = 0,385$ in eine Senkrechte über, die gestrichelt angedeutet ist. Offenbar wird das Ergebnis von Huang und Meng für kleine R reproduziert.

Für die normierte superfluide Dichte erhält man nach (5.148)

$$\tilde{n}_s = 1 - \frac{4}{3}\frac{\tilde{R}}{\sqrt{\tilde{a}_s \tilde{n}_0}}. \quad (5.154)$$

Sie ist in Grafik 5.5 aufgetragen. Die superfluide Dichte verschwindet spätestens bei einem Wert von $\tilde{R}/\sqrt{\tilde{a}_s} = 0,36$, welcher gestrichelt eingezeichnet ist, und möglicherweise vorher, falls es vorher zum Phasenübergang kommt. Gestrichelt eingezeichnet ist das Ergebnis von Huang und Meng, welches für kleine R offenbar reproduziert wird.

Trägt man beide Dichten zusammen auf, so ergibt sich Grafik 5.6. Die superfluide Dichte liegt in der Zeichnung stets unterhalb der Kondensatdichte.

Dass die superfluide Dichte stets kleiner ist als die Kondensatdichte, kann als ein Merkmal der Unordnung aufgefasst werden, wonach das Unordnungspotential dafür sorgt, dass lokale Kondensate entstehen, die nichts mehr

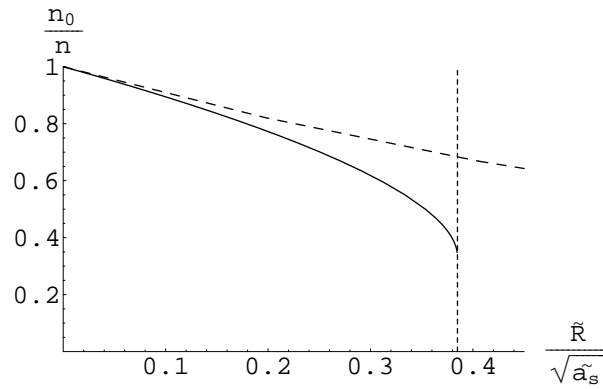


Abbildung 5.4: Normierte Kondensatdichte n_0/n gegen die dimensionslose Unordnung $\tilde{R}/\sqrt{\tilde{a}_s}$ aufgetragen. Die Kondensatdichte geht bei einem Wert von $\tilde{R}/\sqrt{\tilde{a}_s} = 0,385$ in eine Senkrechte über, die gestrichelt angedeutet ist. Es kommt zu einem Phasenübergang 1. Ordnung. Die genaue Stelle des Phasenübergangs ist bei Annahme von Bandlückenfreiheit auf Grund der fehlenden Freien Energie nicht bestimmbar. Ebenfalls gestrichelt und oberhalb der Kondensatkurve ist das Ergebnis von Huang und Meng eingetragen. Die Kurve für die Kondensatdichte ist unabhängig von den Annahmen über die anormalen Korrelationen, nicht aber die Stelle des Phasenübergangs.

zur superfluiden Dichte beitragen. Dies ist ein Lokalisierungsphänomen. Für das chemische Potential folgt aus der Gross-Pitaevskii-Gleichung (5.149)

$$\frac{\bar{\mu}}{a_s} = n - \frac{1}{2}n_0. \quad (5.155)$$

Letztere Gleichung gilt nur in der Kondensatphase.

Glasphase

Die Nichtkondensatphase, die auf Grund der Unordnung entsteht, wird Glasphase genannt, analog zur Theorie der Spingläser [55,56]. Sie ist gekennzeichnet durch $n_0 = 0$. Die superfluide Dichte verschwindet in der Glasphase ebenfalls, wie aus Abbildung 5.5 zu sehen ist. Die Teilchendichtegleichung legt dann den Zusammenhang zwischen der Teilchendichte und dem chemischen Potential fest. Sie lautet nach (5.150)

$$1 = \frac{\bar{R}}{\sqrt{a_s} \sqrt{n - \frac{\bar{\mu}}{a_s}}}. \quad (5.156)$$

Die Lösung dieser Gleichung ist eindeutig. Sie lautet

$$\frac{\bar{\mu}}{a_s} = n - \frac{\bar{R}^2}{a_s}. \quad (5.157)$$

Die Teilchendichte ist in Grafik 5.7 für den Wert $\frac{\bar{R}}{\sqrt{a_s}} = 0,13 \text{ m}^{-3/2}$ gegen das chemische Potential aufgetragen. Offenbar haben unterer Kondensat- und Glasast nicht für großes chemisches Potential denselben Grenzwert. Dies kann man bestätigen, wenn man die Gleichung für die Kondensatdichte (5.151) nach n_0 auflöst und dann den Grenzfall großer Teilchendichten n betrachtet. Es folgt, dass für den unteren Kondensatast gilt

$$n_0 = \frac{\bar{R}^2}{a_s} \left[1 + 2 \frac{\bar{R}^2}{a_s n} + 7 \left(\frac{\bar{R}^2}{a_s n} \right)^2 + \dots \right]. \quad (5.158)$$

Damit haben die Gleichungen für das chemische Potential, (5.155) und (5.157), nicht denselben Grenzwert für große n .

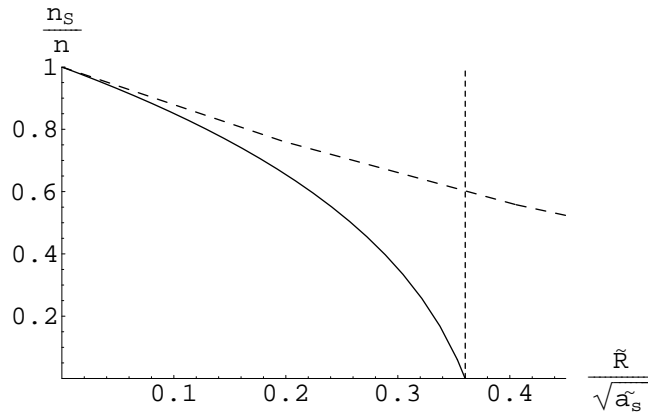


Abbildung 5.5: Normierte superfluide Dichte n_s/n gegen die dimensionslose Unordnung $\tilde{R}/\sqrt{\tilde{a}_s}$ bei Annahme von Bandlückenfreiheit aufgetragen. Die superfluide Dichte verschwindet spätestens bei einem Wert von $\tilde{R}/\sqrt{\tilde{a}_s} = 0,36$, der gestrichelt markiert ist. Gestrichelt und oberhalb der hier berechneten superfluiden Dichte ist das Ergebnis von Huang und Meng eingetragen.

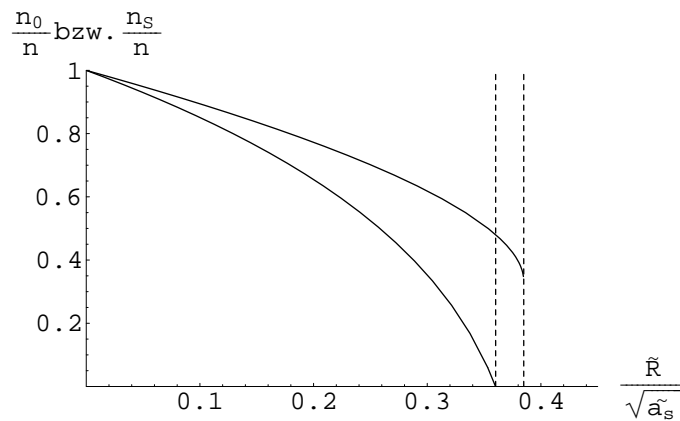


Abbildung 5.6: Normierte Kondensatdichte n_0/n und normierte superfluide Dichte n_s/n gegen die dimensionslose Unordnung $\tilde{R}/\sqrt{\tilde{a}_s}$ bei Annahme von Bandlückenfreiheit aufgetragen. Die superfluide Dichte liegt stets unterhalb der Kondensatdichte.

Eine physikalische Interpretation für das Auftreten einer Glasphase kann gegeben werden: Ein Zufallspotential führt zu einer ungeordneten Potentiallandschaft mit lokalen Minima. In diese fallen die Gasatome, was auch der Grund für die effektive attraktive Wechselwirkung ist. Bei großer Unordnung werden die Potentialbarrieren zwischen den lokalen Potentialminima sehr groß. Damit wird Tunneln zwischen benachbarten Minima unterdrückt. Auf einer globalen Skala können die Atome damit nicht mehr kohärent sein. Unklar ist aber zunächst, ob es in den lokalen Minima zu lokalen Kondensaten kommt, die aus vielen Atomen bestehen, und die lediglich inkohärent zu benachbarten Kondensaten sind, oder ob die Glasphase durch eine Anzahl einzelner Atome bestimmt ist, die sich nicht in lokalen Kondensaten aufhalten.

5.10.2 Konservierender Fall: Erhaltung von Teilchenzahl, Impuls und Energie

In diesem Abschnitt wird davon ausgegangen, dass die hergeleitete Gleichung für ξ in (4.96) für die anormale Korrelation den Vorrang vor der Annahme von Bandlückenfreiheit (5.83) hat. Damit folgt automatisch Erhaltung von Teilchenzahl, Impuls und Energie, d.h. man hat eine konservierende Theorie. Außerdem folgt für Kondensat-

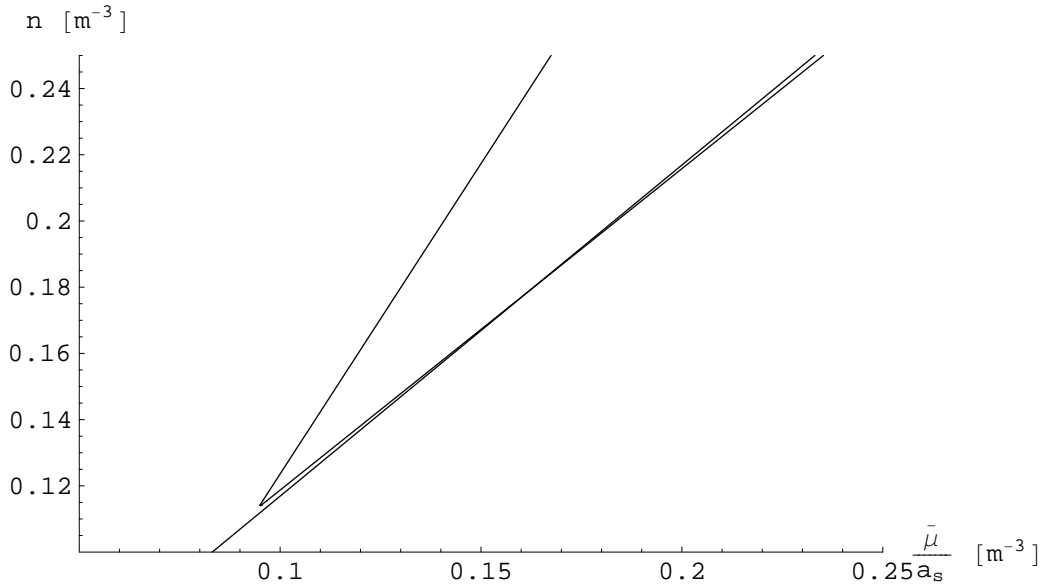


Abbildung 5.7: Teilchendichte n in m^{-3} gegen chemisches Potential $\bar{\mu}/a_s$ in m^{-3} für eine Unordnung von $\bar{R}/\sqrt{a_s} = 0,13 \text{ m}^{-3/2}$ bei Annahme von Bandlückenfreiheit. Zu sehen sind zwei Kondensatäste, welche in einem Punkt beginnen und sich dann zusammen genommen nach rechts öffnen, und der Glasast, der eine durchgezogene Linie bildet. Für große $\bar{\mu}/a_s$ liegt der untere Kondensatast unterhalb des Glasastes. Dieser Kondensatast ist instabil.

und Nichtkondensatphasen

$$\xi = \theta = n - n_0. \quad (5.159)$$

Man hat also stets nichtverschwindende anormale Korrelationen. Falls n_0 verschwindet, wird daher unter Berufung auf Nozieres und Saint James von Paarkondensation gesprochen [24]. Fordert man also eine konservierende Theorie, so folgt bei Verschwinden der globalen Kondensatdichte automatisch Paarkondensation. Das bemerkenswerteste Phänomen dieser paarkondensierten Phase ist, dass es keinerlei Phasenkohärenz gibt, wie sie zeigen. Global gesehen zeigt sich dies durch das Verschwinden der globalen Kondensatdichte n_0 .

Gleichung (5.159) führt zunächst auf die Gross-Pitaevskii-Gleichung

$$[-\mu + 3gn - 2gn_0]\sqrt{n_0} = 0. \quad (5.160)$$

Die superfluide Dichte ist dann nach (5.138) bestimmt durch

$$n_s = n - \frac{4}{3} \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{1}{\Gamma(3/2)} \int_0^\infty d\epsilon \epsilon^{3/2} \frac{Rn}{(\epsilon - \mu + gn)(\epsilon - \mu + 3gn)^2}. \quad (5.161)$$

Kondensatphase

Das Ergebnis für die Teilchendichte hängt nicht davon ab, welche Annahmen man über die zu beachtenden Gleichungen macht, und ist daher gegeben durch

$$\tilde{n}_0 = 1 - \frac{\tilde{R}}{\sqrt{\tilde{a}_s \tilde{n}_0}}. \quad (5.162)$$

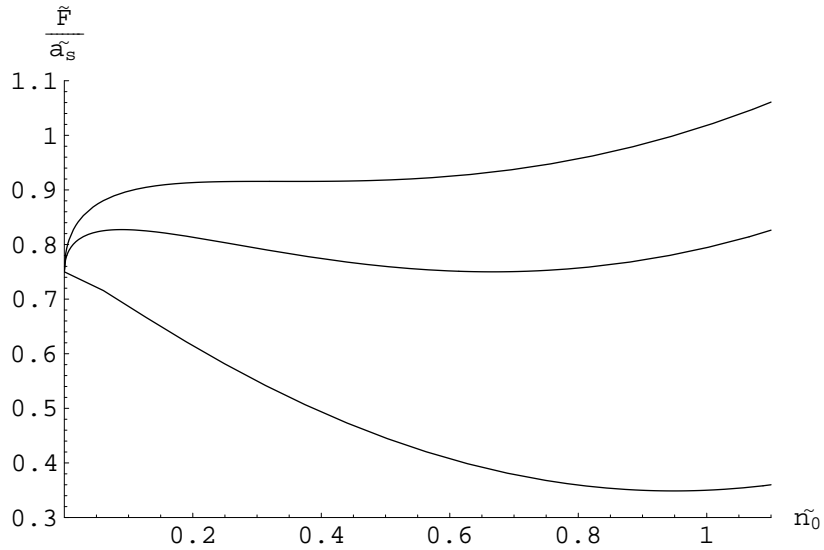


Abbildung 5.8: Konservierende Theorie: Dimensionsloses Potential über der dimensionslosen Wechselwirkung \tilde{F}/\tilde{a}_s gegen die normierte Kondensatdichte \tilde{n}_0 , aufgetragen für drei verschiedene Werte der dimensionslosen Unordnung $\tilde{R}/\sqrt{\tilde{a}_s}$. Die Extrema entsprechen hierbei der Freien Energie der Lösungen von (5.162). Die untere Kurve ist für $\tilde{R}/\sqrt{\tilde{a}_s} = 0,05$, die mittlere für $\tilde{R}/\sqrt{\tilde{a}_s} = 0,272$ und die obere für $\tilde{R}/\sqrt{\tilde{a}_s} = 0,384$ gezeichnet.

Hier soll eine Stabilitätsdiskussion durchgeführt werden. Man erhält zunächst für die Freie Energie (5.144) unter Benutzung der Gross-Pitaevskii-Gleichung (5.160) die dimensionslose Freie Energie unter den hier gemachten Annahmen:

$$\frac{\tilde{F}}{\tilde{a}_s} = \left(\frac{3}{2} - \tilde{n}_0\right) \left(1 - \tilde{n}_0\right) + \frac{1}{2} \left[\frac{1}{2}\tilde{n}_0^2 - \frac{3}{2}(1 - \tilde{n}_0)^2\right] + 2\frac{\tilde{R}}{\sqrt{\tilde{a}_s}}\sqrt{\tilde{n}_0}. \quad (5.163)$$

Dabei ist n_0 aus Extremalisierung der Freien Energie zu bestimmen, was äquivalent zur Gleichung für die Kondensatdichte (5.162) ist. Extremalisiert man den Ausdruck (5.163) nicht, kann man ihn auch als Potential auffassen, welches von der normierten Kondensatdichte abhängig ist. Dies soll hier geschehen, wobei dieses Potential der Einfachheit halber denselben Namen \tilde{F} bekommt. Dieses dimensionslose Potential über der Wechselwirkung, \tilde{F}/\tilde{a}_s , ist in Abbildung 5.8 für drei verschiedene Werte der dimensionslosen Unordnung $\tilde{R}/\sqrt{\tilde{a}_s}$ dargestellt. Die Extrema entsprechen hierbei Lösungen der Gleichung für die Kondensatdichte (5.162), und sind die tatsächliche Freie Energie dieser Lösungen. Die oberste Kurve in Abbildung 5.8 ist hierbei für $\tilde{R}/\sqrt{\tilde{a}_s} = 0,384$ aufgetragen, die mittlere für $\tilde{R}/\sqrt{\tilde{a}_s} = 0,272$, und die untere für $\tilde{R}/\sqrt{\tilde{a}_s} = 0,05$. Offenbar ist nur der Kondensatzweig, der dem rechten Minimum entspricht, und der in Abbildung 5.4 dargestellt wurde, stabil, und nicht der andere Kondensatzweig, der dem lokalen Maximum entspricht. Der Phasenübergang findet, wie noch gezeigt wird, bei $\tilde{R}/\sqrt{\tilde{a}_s} = 0,354$ statt (siehe (5.169)), da an dieser Stelle die Freie Energie des stabilen Kondensatzweigs gleich der des Nichtkondensatzweigs ist.

Das chemische Potential ist in der Kondensatphase bekanntlich durch die Gross-Pitaevskii-Gleichung (5.160) festgelegt. Setzt man dies in die Gleichung für die superfluide Dichte (5.161) ein, so erhält man

$$n_s = n - \frac{4}{3} \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \frac{1}{\Gamma(3/2)} \int_0^\infty d\epsilon \epsilon^{3/2} \frac{Rn}{(\epsilon - 2gn + 2gn_0)(\epsilon + 2gn_0)^2}. \quad (5.164)$$

Offenbar integriert man hier über einen Pol. Obschon dies auf den ersten Blick unphysikalisch erscheint, so ergibt eine Renormierung der Unordnungsstärke, die P. Navez vorschlug [49], dennoch einen endlichen Beitrag. Für den Fall räumlich unkorrelierter Unordnung gibt seine Methode dieselben Ergebnisse wie eine modifizierte Version

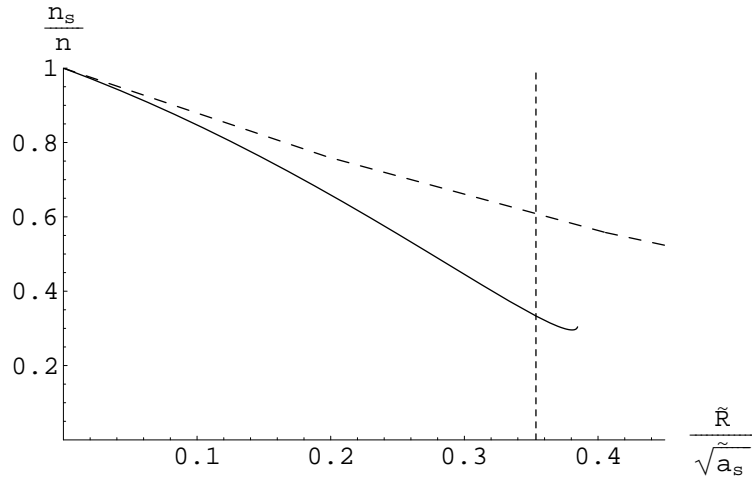


Abbildung 5.9: Konservierender Fall: Normierte superfluide Dichte n_s/n gegen die dimensionslose Unordnung $\tilde{R}/\sqrt{\tilde{a}_s}$ aufgetragen. Gleichzeitig existiert eine nichtverschwindende Kondensatdichte. Das chemische Potential wird daher durch die Gross-Pitaevskii-Gleichung festgelegt. Gestrichelt eingezeichnet ist die Stelle, bei der es zum Phasenübergang kommt. Diese liegt bei $\tilde{R}/\sqrt{\tilde{a}_s} = 0,354$. Oberhalb der hier berechneten Kurve ist gestrichelt das Ergebnis von Huang und Meng eingetragen.

der dimensional Regularisierung, deren Berechnung in Anhang E zu finden ist. Das Ergebnis für die superfluide Dichte lautet demnach

$$\tilde{n}_s = 1 - \frac{8}{3} \frac{\tilde{R}}{\sqrt{\tilde{a}_s}} \left[\frac{3}{2} \sqrt{\tilde{n}_0} - \tilde{n}_0^{3/2} \right]. \quad (5.165)$$

Dieses Ergebnis ist nur in der Kondensatphase gültig. Superfluidität kann jedoch auch ohne Kondensation auftreten, was im nächsten Abschnitt besprochen wird. Die superfluide Dichte im Kondensat ist in Abbildung 5.9 dargestellt. Sie macht kurz vor Erreichen der Linie, an der die Gleichung keine Lösung mehr liefert, eine Abbiegung nach oben. Dieser letzte Schlenker ist nicht ernst zu nehmen, da es vorher zum Phasenübergang kommt, der durch die gestrichelte Linie bei $\tilde{R}/\sqrt{\tilde{a}_s} = 0,354$ angedeutet ist. Das Ergebnis von Huang und Meng, das ebenfalls gestrichelt eingezeichnet ist, wird für kleine R reproduziert.

Kondensatdichte und superfluide Dichte zusammen sind in Abbildung 5.10 dargestellt. Sie laufen zuerst bis zu einem Wert $\tilde{R}/\sqrt{\tilde{a}_s} = 0,325$ auseinander, um danach allmählich wieder zusammen zu laufen. Quantifiziert ist dies

$$\begin{aligned} \tilde{n}_0 \left(\frac{\tilde{R}}{\sqrt{\tilde{a}_s}} = 0,325 \right) - \tilde{n}_s \left(\frac{\tilde{R}}{\sqrt{\tilde{a}_s}} = 0,325 \right) &= 0,178, \\ \tilde{n}_0 \left(\frac{\tilde{R}}{\sqrt{\tilde{a}_s}} = 0,354 \right) - \tilde{n}_s \left(\frac{\tilde{R}}{\sqrt{\tilde{a}_s}} = 0,354 \right) &= 0,166. \end{aligned} \quad (5.166)$$

Ein solches Verhalten erscheint unphysikalisch, ist aber angesichts der nur marginalen Unterschiede und dem nahe liegenden Phasenübergang nicht signifikant genug, um die Bewertung des Ergebnisses so stark zu stören, dass es automatisch als unphysikalisch gelten muss.

Für das chemische Potential folgt aus der Gross-Pitaevskii-Gleichung (5.160) die Gleichung

$$\frac{\bar{\mu}}{a_s} = \frac{3}{2} n - n_0, \quad (5.167)$$

was wiederum nur in der Kondensatphase Gültigkeit besitzt.

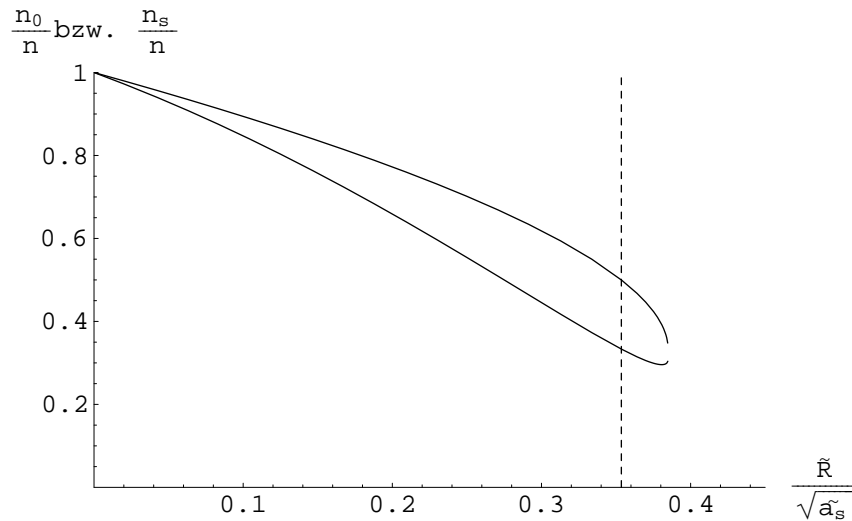


Abbildung 5.10: Konservierender Fall: Normierte Kondensatdichte n_0/n und normierte superfluide Dichte n_s/n gegen die dimensionslose Unordnung $\tilde{R}/\sqrt{\tilde{a}_s}$ aufgetragen. Die superfluide Dichte ist stets kleiner als die Kondensatdichte. Gestrichelt eingezeichnet ist $\tilde{R}/\sqrt{\tilde{a}_s} = 0,354$, wo es zum Phasenübergang in die Nichtkondensatphase kommt.

Paarkondensatphase

Die Definition der paarkondensierten Phase geschieht durch Annahme des Verschwindens der Kondensatdichte, also $n_0 = 0$. Die Bezeichnung "paarkondensiert" ist hierbei im Sinne von Nozieres und Saint James [24] zu verstehen. Bei Annahme des Verschwindens der Kondensatdichte kann man aus (5.140) das chemische Potential bestimmen. Das Ergebnis lautet

$$\frac{\bar{\mu}}{a_s} = \frac{3}{2}n - \frac{\bar{R}^2}{a_s}. \quad (5.168)$$

Ein Vergleich mit (5.167) unter Beachtung der Entwicklung der Kondensatdichte (5.158) liefert dann, dass der Grenzwert für große n in beiden Fällen gleich ist. Die Freie Energie dieser Phase ist dann

$$\frac{\tilde{F}}{\tilde{a}_s} = \frac{3}{4} + \frac{\tilde{R}^2}{\tilde{a}_s}. \quad (5.169)$$

Man kann leicht nachrechnen, dass sie für $\tilde{R}/\sqrt{\tilde{a}_s} = 0,272$ gleich derjenigen des instabilen Kondensatzweigs ist. Ein weiteres Ergebnis ist, dass sie für $\tilde{R}/\sqrt{\tilde{a}_s} = 0,354$ gleich derjenigen des stabilen Kondensatzweigs ist. An dieser Stelle geschieht also der Phasenübergang. Die Teilchendichte ist in Abbildung 5.11 gegen das chemische Potential für $\frac{\bar{R}}{\sqrt{a_s}} = 0,3 \text{ m}^{-3/2}$ aufgetragen. Man sieht zwei Kondensatäste, die in einem Punkt beginnen, und einen Ast der paarkondensierten Phase, der eine durchgezogene Linie bildet. Es handelt sich um ein typisches Bild für einen Phasenübergang 1. Ordnung. Der untere Kondensatast ist instabil. Die Kondensatäste haben in ihrem Ursprung einen Knick, der durch die senkrechte Tangente in der Kondensatdichte in Abbildung 5.4 zu erklären ist. Sie bilden also eine Spitze.

Nimmt man nun an, dass man sich in der paarkondensierten Phase befindet, so ist durch (5.168) das chemische Potential bestimmt. Daraus folgt allerdings ebenfalls eine superfluide Dichte. Setzt man das chemische Potential (5.168) in die Gleichung für die superfluide Dichte (5.138) unter Beachtung der hier gemachten Näherungen ein,

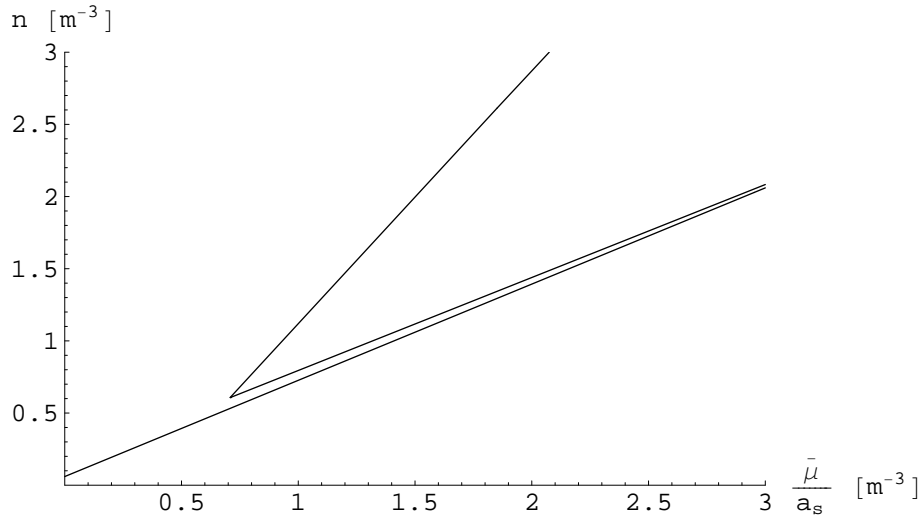


Abbildung 5.11: Konservierender Fall: Teilchendichte n gegen chemisches Potential $\bar{\mu}/a_s$ für eine Unordnung von $\bar{R}/\sqrt{a_s} = 0,3 \text{ m}^{-3/2}$. Zu sehen sind zwei Kondensatäste, welche in einem Punkt beginnen und sich dann nach rechts öffnen, und der Ast für die paarkondensierte Phase, der eine durchgezogene Linie bildet. Der untere Kondensatast trifft im Unendlichen auf den Ast der paarkondensierten Phase.

so folgt

$$n_s = n - \frac{4}{3} \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{1}{\Gamma(3/2)} \int_0^\infty d\epsilon \epsilon^{3/2} \frac{Rn}{\left(\epsilon - 2gn + 2g\frac{\bar{R}^2}{a_s} \right) \left(\epsilon + 2g\frac{\bar{R}^2}{a_s} \right)^2}. \quad (5.170)$$

Diese Gleichung muss erneut wie in Anhang E erläutert berechnet werden. Das Ergebnis lautet

$$\tilde{n}_s = 1 - \frac{8\tilde{R}^2}{3\tilde{a}_s} \left[\frac{3}{2} - \frac{\tilde{R}^2}{\tilde{a}_s} \right]. \quad (5.171)$$

Es ist in Abbildung 5.12 gleichzeitig mit der superfluiden Dichte aufgetragen, die sich ergibt, wenn man das chemische Potential durch die Gross-Pitaevskii-Gleichung festlegt, wie es in (5.165) geschah. Zumindest für kleine $\tilde{R}/\sqrt{\tilde{a}_s}$ ist die untere Kurve richtig, da noch ein Kondensat existiert, vgl. Huang und Meng [18], und nach den Ergebnissen in dieser Arbeit bleibt das Kondensat bis $\tilde{R}/\sqrt{\tilde{a}_s} = 0,354$ erhalten. Nimmt man die Kurven ernst, so müsste die superfluide Dichte daher an der Stelle des Phasenübergangs einen Sprung machen. Die superfluide Dichte würde also an der Stelle des Phasenübergangs zunehmen. Eine physikalische Erklärung kann hierfür nicht gegeben werden. Folglich verschwindet die superfluide Dichte in der paarkondensierten Phase: $n_s = 0$, falls $n_0 = 0$. Nicht eingezeichnet ist das Ergebnis von Huang und Meng, dessen Verlauf man aber in Abbildung 5.9 erkennt. Die theoretische superfluide Dichte der paarkondensierten Phase weicht offenbar davon ab, was ein weiterer Hinweis darauf ist, dass sie unphysikalisch ist.

Auch die paarkondensierte Phase kann verstanden werden. Dazu bedient man sich des schon verwendeten Bildes der lokalen Potentiallandschaft des Zufallspotentials, in der die Atome in lokalen Minima fallen. Die Minima sind bei großer Unordnung so tief, und damit die Barrieren zwischen den einzelnen Minima so hoch, dass es nicht mehr zu Tunneleffekten kommt. Damit verlieren die benachbarten Minima die globale Phasenkohärenz. Im Fall der konservierenden Theorie verschwinden nun die anormalen Korrelationen nicht. Dies wird im Sinne von Nozieres und Saint James interpretiert [24]. Demnach bekommt man lokale Kondensate. Damit sind in den lokalen Minima nicht einzelne Atome zu finden, sondern jeweils ein größerer Verbund von Atomen, die lokalen Kondensate.

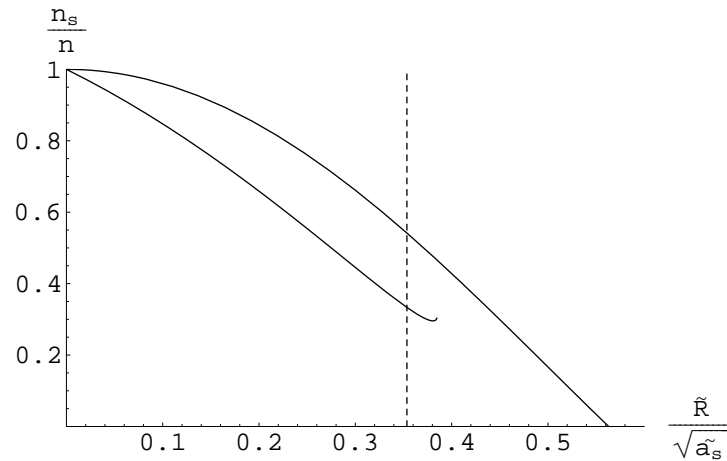


Abbildung 5.12: Konservierender Fall. Obere Kurve: Theoretisch zu erwartende normierte superfluide Dichte n_s/n der paarkondensierten Phase gegen die Unordnung $\tilde{R}/\sqrt{\tilde{a}_s}$ aufgetragen. Das chemische Potential ist bei der oberen Kurve durch (5.168) festgelegt, da angenommen wird, dass ein Kondensat nicht gleichzeitig existiert. Untere Kurve: Superfluide Dichte der Kondensatphase. Das chemische Potential ist durch die Gross-Pitaevskii-Gleichung festgelegt, da hier angenommen wird, dass gleichzeitig ein Kondensat vorhanden ist. An der gestrichelten Linie kommt es zum Phasenübergang. Vorher ist die untere Kurve physikalisch realisiert.

5.10.3 Interpretation

Die hergeleitete Molekularfeldtheorie sagt, analog zur Hartree-Fock-Theorie in der Arbeit von Robert Graham und Axel Pelster [25], einen Phasenübergang 1. Ordnung zwischen Nichtkondensat- und Kondensatphase voraus. Die Voraussage ist, dass die Kondensatdichte für einen bestimmten Unordnungswert, der von den Annahmen über die anormalen Korrelationen abhängt, springt, was ein typisches Merkmal für einen Phasenübergang 1. Ordnung ist. Zusätzlich enthält diese Theorie den korrekten Wert für die Entleerung des Grundzustandes und der superfluiden Dichte nach Huang und Meng [18] für kleine Unordnung.

Wenn man das Problem ernst nimmt, dass sich superfluide Dichte und Kondensatdichte bei Annahme der konservierenden Theorie wieder annähern, so legen die Ergebnisse für die superfluide Dichte und das chemische Potential zwei unterschiedliche Forderungen nahe. Für die Berechnung der superfluiden Dichte scheint es dann sinnvoll zu sein, von einem bandlückenfreien Spektrum auszugehen, wie es in Abschnitt 5.10.1 geschah. Dort gibt es ein Verhalten, welches physikalisch glaubwürdig erscheint. Berechnet man jedoch das chemische Potential mit Annahme von Bandlückenfreiheit, so führt dies zu einem Fehlverhalten desselben. Dies ist vermutlich darauf zurückzuführen, dass man die Teilchenzahlerhaltung verletzt, wenn man die Forderung nach einem bandlückenfreien Anregungsspektrum erhebt. Fordert man das bandlückenfreie Spektrum nicht, wie in Abschnitt 5.10.2 geschehen, so erhält man ein glaubwürdiges Diagramm für das chemische Potential. Jedoch verhält sich die superfluide Dichte unphysikalisch, und die fehlende Bandlückenfreiheit in der Kondensatphase widerspricht dem Hugenholtz-Pines-Theorem [41].

Beide Annahmen führen also im Prinzip zu unphysikalischem Verhalten in manchen Bereichen, aber zu vernünftigem Verhalten in anderen. Eine Analogie findet sich bereits im grundsätzlichen Problem der Hartree-Fock-Bogoliubov-Näherung ohne Unordnung. Auch dort ist die Forderung nach Bandlückenfreiheit verletzt. Die Näherung, die dies repariert, ist im Falle ohne Unordnung die Popov-Näherung. Deren Analogon für die Unordnung ist hier in Abschnitt 5.10.1, wo die Annahme eines bandlückenfreien Spektrums gemacht wurde, durchgeführt worden. Zufällig gibt es bei der Berechnung des chemischen Potentials bei der Popov-Näherung keine Probleme.

Trotzdem verliert man die Freie Energie als thermodynamisches Potential, aus dem man die Gleichungen dieser Näherung herleiten kann. Mit Unordnung hat man zusätzliche Probleme mit dem chemischen Potential.

Ein Vorschlag wäre es nun, Bandlückenfreiheit dort zu fordern, wo es im Falle des Nichtforderns zu Problemen kommt, und demnach eine problembezogene Näherung zu machen. Dies ist nicht konsistent. Frühere Näherungen widersprechen jedoch ebenfalls physikalischen Prinzipien. Falls man die Probleme dieser früheren Näherungen als gravierender betrachtet als die Nichtkonsistenz, so kann man diese Nichtkonsistenz rechtfertigen. Verwendet man die Forderung nach Bandlückenfreiheit nur dort, wo es auf die Berechnung von Teilchendichten und Anregungsspektren ankommt, aber lässt sie weg, wenn es um die Berechnung von Energien geht, so lässt sich eine Theorie formulieren, die glaubwürdige physikalische Ergebnisse liefert. Es wäre allerdings wünschenswert, konkurrierende theoretische Ansätze zu vergleichen, um zu sehen, welche Probleme spezifisch von der Hartree-Fock-Bogoliubov-Näherung her kommen, und welche allgemeinerer Natur sind. Experimentelle Daten für große Unordnung in einer harmonischen Falle, die man mit den Ergebnissen einer solchen Hybridtheorie vergleichen kann, wären ebenfalls wünschenswert. Sollten diese Daten die Ergebnisse einer solchen Theorie bestätigen, wäre es u.U. sinnvoll, diese weiter zu entwickeln.

Möglich wäre auch, dass beide Abschnitte die Realität in unterschiedlichen Regimes jeweils besser beschreiben. Hierbei sind unterschiedliche Teilchendichten, Wechselwirkungen und Unordnungsstärken vorstellbar, die das Verhalten des Systems beeinflussen können. Auch die Korrelationslänge des Zufallspotentials, die hier als 0 angenommen wurde, könnte das Verhalten des Systems signifikant beeinflussen. Dies ist aber nicht mehr als Spekulation.

Der abnehmende Unterschied zwischen Kondensatdichte und superfluider Dichte in Abschnitt 5.10.2, also im konservierenden Fall, ist sehr klein. Hier muss man berücksichtigen, dass man bereits bei der Herleitung der Molekularfeldgleichungen genähert hat: Man hat Fluktuationen höherer als zweiter Ordnung durch Fluktuationen zweiter Ordnung ausgedrückt. Da eine nur minimal verbesserte Näherung dieses Verhalten wieder korrigieren könnte, kann dieses problematische Verhalten nicht dazu herangezogen werden, das Ergebnis für die superfluide Dichte in Abschnitt 5.10.2 als gravierendes Kennzeichen für die Falschheit der in diesem Abschnitt vorgestellten Theorie zu nehmen.

Unphysikalisch bleibt das nicht bandlückenfreie Spektrum in der Kondensatphase, weshalb auch Abschnitt 5.10.1 seine Existenzberechtigung hat. Allerdings ist das Ergebnis für das chemische Potential in diesem Abschnitt sehr problematisch, sodass dieser Abschnitt vermutlich mit größerer Vorsicht zu behandeln ist als Abschnitt 5.10.2. Eine abschließende Bewertung soll daher nicht gegeben werden, und bleibt künftigen Arbeiten überlassen.

Bei Forderung eines bandlückenfreien Spektrums ergeben sich bei schwacher Wechselwirkung und $T = 0$ folgende Aussagen:

- Es gibt für starke Unordnung eine Glasphase, bei der die Kondensatdichte verschwindet.
- Diese Phase ist nicht superfluid und demnach eine lokalisierte Phase.
- Der Phasenübergang ist von erster Ordnung. Dies kann jedoch angezweifelt werden, wobei die Gründe dieselben sind, die z.B. auch bei der Hartree-Fock-Theorie an der theoretisch vorhergesagten Ordnung des Phasenübergangs zweifeln lassen.
- Möglicherweise existiert eine nicht superfluide Phase, in der ein globales Kondensat existiert.
- Falls diese Phase existiert, so ist deren Spektrum bandlückenfrei.
- Die Stelle des Phasenübergangs kann nicht bestimmt werden.

- Belastbare Stabilitätsuntersuchungen sind mit dieser Annahme nicht durchführbar, und müssen durch Vergleiche mit Ergebnissen anderer Ansätze ersetzt werden.
- Die Atome sind in den Glasphasen in lokalen Potentialminima zu finden. Atome in unterschiedlichen Minima sind nicht kohärent. Es ist nicht klar, ob sich in den Minima einzelne Atome oder lokale Kondensate befinden.

Bei Annahme, dass die hergeleiteten Gleichungen, und damit die Konservierung, den Vorrang vor der Forderung nach einem bandlückenfreien Spektrum haben, gilt hingegen:

- Es gibt für starke Unordnung eine paarkorrelierte Phase, in der die anormalen Korrelationen nicht verschwinden.
- Diese Phase ist ebenfalls nicht superfluid und demnach eine lokalisierte Phase.
- Das Spektrum dieser Phase besitzt eine Bandlücke.
- Der Phasenübergang ist wiederum von erster Ordnung. Dies kann jedoch aus genannten Gründen ebenfalls angezweifelt werden.
- Der Phasenübergang geschieht für $\tilde{R}/\sqrt{\tilde{a}_s} = 0,354$.
- Für $\tilde{R}/\sqrt{\tilde{a}_s} > 0,325$ nähern sich superfluide und Kondensatdichte wieder aneinander an, die hier präsentierte Theorie bricht allmählich zusammen.
- Die Atome sind in der paarkondensierten Phase in lokalen Potentialminima zu finden. Da die anormalen Korrelationen in dieser Phase nicht verschwinden, müssen in diesen Minima lokale Kondensate zu finden sein.

Kapitel 6

Zusammenfassung und Ausblick

6.1 Zusammenfassung der Ergebnisse

Bei Verwendung des Replika-Tricks in Kapitel 2 kann gezeigt werden, dass sich die Unordnung durch eine effektive attraktive Wechselwirkung beschreiben lässt (2.52). Dies kann verstanden werden, da sich die Atome in lokalen Potentialen mit lokalen Minima befinden. Da die Atome in diese Minima hineinfallen, sieht es von außerhalb des Systems so aus, als wenn sie attraktiv miteinander wechselwirkten.

Die Verschiebung der kritischen Temperatur konnte berechnet werden. Es konnten Gleichungen hergeleitet werden, die es im Prinzip erlauben, bei Annahme eines beliebigen Zufallspotentials mit isotroper 2-Punkt Korrelationsfunktion die Verschiebung der kritischen Temperatur numerisch zu berechnen (3.52), (3.109).

In einzelnen Fällen funktioniert dies auch analytisch. Es wurden hier zwei Formen der 2-Punkt Korrelationsfunktion des Zufallspotentials betrachtet, zum einen eine Gauß-Korrelation (3.56) und zum anderen eine Lorentz-Korrelation (3.63).

Die Einbeziehung der Falle wurde im Rahmen dieser Diplomarbeit durch eine semiklassische Verallgemeinerung der Berechnung der Verschiebung der kritischen Temperatur des freien Bose-Gases erreicht, die als lokale-Dichte Näherung bekannt ist [32].

Für beide Formen der Korrelationsfunktion lassen sich analytische Ausdrücke herleiten, die allerdings durch konvergente unendliche Summen gegeben sind (3.136), (3.148), (3.166), (3.178).

Das Ergebnis von Lopatin und Vinokur für das freie Bose-Gas [20] ließ sich im Grenzfall, dass die Korrelationslänge verschwindet, in beiden Fällen reproduzieren. Eine numerische Auswertung der hergeleiteten Ausdrücke für die Verschiebung der kritischen Temperatur war sowohl für das freie Bose-Gas als auch für das Bose-Gas in einem harmonischen Fallenpotential möglich. Eine Abschätzung des Kurvenverlaufs ist mit analytischen Mitteln jeweils möglich. Im Fall des freien Bose-Gases bei Annahme einer Lorentz-Korrelation mussten aber Regularisierungsmethoden verwendet werden. Bei beiden Korrelationen verhält sich die Verschiebung der kritischen Temperatur, sowohl im freien Bose-Gas als auch bei Betrachtung einer harmonischen Falle, demnach qualitativ gleich.

Im Falle des freien Bose-Gases fängt die Verschiebung der kritischen Temperatur negativ an, steigt dann linear, ändert ihr Vorzeichen, und geht dann für große Korrelationslängen gegen einen konstanten positiven Wert, der bei Gauß- und Lorentz-Korrelation gleich ist, und betragsmäßig dem Anfangswert der Verschiebung für verschwindende Korrelationslänge entspricht. Es ließ sich zeigen, dass sich die Verschiebung bei großer Korrelationslänge reziprok zu dieser an den Wert für unendliche Korrelationslänge annähert. Die kritische Temperatur des freien Bose-Gases in einem Zufallspotential ist in den Abbildungen 3.1 (Gauß) und 3.3 (Lorentz) aufgetragen.

Die negative Verschiebung bei kleiner Korrelationslänge entspricht dem umgekehrten Verhalten wie bei der Ver-

schiebung der kritischen Temperatur des freien Bose-Gases mit repulsiver Wechselwirkung. Da die Unordnung als effektive attraktive Wechselwirkung zu beschreiben ist, ist dieses Verhalten verständlich. Der Vorzeichenwechsel bei der Verschiebung muss angezweifelt werden, weil nicht klar ist, ob es, wie im Fall der repulsiven Wechselwirkung, auch nicht störungstheoretische Beiträge zur Verschiebung gibt, die dieses Ergebnis ändern können. Die physikalische Vorstellung eines effektiv attraktiv wechselwirkenden Gases widerspricht dem Vorzeichenwechsel. Bei der Falle gibt es bei verschwindender Korrelationslänge keine Verschiebung, danach steigt sie linear, und es ist ein Maximum der Verschiebung zu beobachten. Für große Korrelationslängen verschwindet diese Verschiebung wieder, proportional zur inversen Korrelationslänge. Die kritische Temperatur des Bose-Gases in einer harmonischen Falle ist in den Abbildungen 3.5 (Gauß) und 3.7 (Lorentz) aufgetragen.

Auch hier gibt es die Analogie zum Fall der repulsiven Wechselwirkung, bei dem die Verschiebung der kritischen Temperatur in der Falle negativ ist. Das Maximum der Verschiebung entsteht an der Stelle, an der die dominante Längenskala für kleine Korrelationslänge, die Oszillatorlänge, in die für große Korrelationslänge, gegeben durch den mittleren Teilchenabstand, übergeht. Setzt man typische Werte experimentell realisierter Parameter ein, so kann man zeigen, dass die Verschiebung bei genügend großer Unordnung beobachtbar sein sollte.

Bei der Behandlung der Molekularfeldtheorie kam es zunächst zu Problemen dadurch, dass im Prinzip Gleichungen analytisch aufgelöst werden müssten, die nur sehr schwer zu behandeln sind. Eine Auflösung ist zwar im Prinzip möglich, aber die dann entstehenden Ausdrücke sind so kompliziert, dass an eine weitere analytische Behandlung praktisch nicht zu denken ist. Dies kann umgangen werden, indem man sich auf den interessantesten Spezialfall beschränkt, den großer Unordnung bei verschwindend kleiner Wechselwirkung.

Die Behandlung der Molekularfeldtheorie führte außerdem zu Problemen bei der Bandlückenfreiheit. Nimmt man die Gleichungen so, wie sie hergeleitet werden, so bekommt man eine Bandlücke in der Kondensatphase. Dies ist bereits im Fall ohne Unordnung ein Problem [42], denn es widerspricht dem Hugenholtz-Pines Theorem [41]. Im folgenden wird dann versucht, eine Theorie zu entwickeln, die analog zur Popov-Theorie Bandlückenfreiheit fordert [45–48]. Zur Begründung wird dabei das Argument verwendet, dass bestimmte Diagramme überzählt sind, wie Shi und Griffin [43] sowie Proukakis, Burnett und Stoof [44] argumentieren.

Die Kurven für die superfluide Dichte und die Kondensatdichte, die dann entstehen, ergeben für kleine Unordnung das Resultat von Huang und Meng [18] (Abbildungen 5.4, 5.5 und 5.6). Für große Unordnung taucht möglicherweise zunächst eine Phase mit globalem Kondensat, aber ohne superfluide Dichte auf, was aber unsicher ist, da nicht bestimmt werden konnte, wo der Phasenübergang stattfindet. Falls diese Phase existiert, so hat man eine lokalisierte Phase mit einem bandlückenfreien Spektrum und mit globalem Kondensat. Diese Phase könnte man als Glasphase bezeichnen.

Auf jeden Fall verschwindet bei einer bestimmten Unordnung, die möglicherweise größer ist, als die zum Verschwinden der superfluiden Dichte benötigte, das globale Kondensat. Diese Phase ist ebenfalls lokalisiert, ist also (ebenfalls) eine Glasphase "zweiter Art", aber das Spektrum hat hier eine Bandlücke. Dies stellt hier jedoch kein Problem dar, da Kondensatdichte und Paarkorrelation dann verschwinden. Das Problem bei der Näherung, dass man Bandlückenfreiheit fordert, ist, dass dann die Isothermen von Kondensat und Glas im Diagramm der Teilchendichte gegen das chemische Potential nicht mehr ineinander übergehen (Abbildung 5.7).

Möchte man dies erreichen, so darf die anormale Korrelation in der Glasphase nicht verschwinden, was insbesondere der Forderung nach Bandlückenfreiheit in der Kondensatphase widerspricht. Auf die Kondensatdichte hat das Nichtverschwinden der anormalen Korrelationen keinen Einfluss, und die Isothermen im $n - \mu$ -Diagramm gehen ineinander über (Abbildung 5.11). Die superfluide Dichte bekommt dann aber kurz vor dem Phasenübergang, dessen Stelle in diesem Fall bestimmt werden kann, ein Verhalten, das nur schwer interpretiert werden kann, und vermutlich unphysikalisch ist, da sich Kondensatdichte und superfluide Dichte wieder aneinander annähern (Abbildung 5.10). Falls die Ergebnisse aber die physikalische Wirklichkeit widerspiegeln, so erhält man jenseits einer

kritischen Unordnung eine parkondensierte lokalisierte Phase ohne globale Phasenkohärenz, genau wie sie von Nozieres und Saint James vorhergesagt wird [24]. Diese Phase müsste aber eine Bandlücke im Anregungsspektrum der 1-Teilchen-Anregungen beinhalten. Dies ist nicht Besorgnis erregend, da diese Bandlücke die Bindungsenergie der 2-Teilchen-Anregungen ist.

6.2 Ausblick

In Kapitel 3 wurde die Verschiebung der kritischen Temperatur in 1. Ordnung der Unordnungsstärke R hergeleitet. Für zwei spezielle Formen der 2-Punkt Korrelationsfunktion wurden analytische und numerische Ergebnisse präsentiert. Dabei fiel auf, dass die Form der Kurve nicht stark von der Korrelationsfunktion abhängt. Hier wäre es interessant, universelle Eigenschaften zu untersuchen.

Direkt aber könnten auch andere Formen der 2-Punkt Korrelationsfunktion für das Zufallspotential auf ihre Auswirkung auf die kritische Temperatur untersucht werden. Rechenformeln hierfür existieren. Es ist aber nicht zu erwarten, dass sich entscheidende qualitative Unterschiede ergeben.

Zur kritischen Temperatur könnten auch Experimente durchgeführt werden, oder ggf. zunächst experimentelle Techniken entwickelt werden. Es wäre interessant zu beobachten, ob die theoretischen Kurven reproduziert werden können, insbesondere falls es möglich ist, dass man mit unterschiedlichen Korrelationslängen des Zufallspotentials arbeitet. Hierbei wäre es auch wünschenswert, wenn experimentelle Arbeiten die Korrelationsfunktion des verwendeten Zufallspotentials in Zukunft angeben, damit ein schneller Vergleich zu theoretischen Resultaten möglich ist.

Ein noch zu untersuchender theoretischer Aspekt existiert für das freie Bose-Gas. So ist nicht klar, ob der berechnete störungstheoretische Beitrag für die Temperaturverschiebung der einzige Beitrag ist. Da es im Falle des repulsiv wechselwirkenden freien Bose-Gases auch nicht störungstheoretische Beiträge zur Temperaturverschiebung gibt, ist dies im Prinzip auch für den Fall der replika-induzierten attraktiven Wechselwirkung zu erwarten. Diese Beiträge sind zu berechnen, oder sich anderweitig zu beschaffen, z.B. durch Monte-Carlo Simulationen.

Die Molekularfeldtheorie, die in Kapitel 4 hergeleitet und in Kapitel 5 besprochen wurde, besitzt noch viele Punkte, an denen sie weiter untersucht und ausgebaut werden kann. Ein erster Schritt wäre es, eine Renormierungsvorschrift für die Unordnung zu entwickeln, die analog zur T-Matrix-Methode funktioniert [30]. Statt Wechselwirkungskonstante g und Unordnungsstärke R wäre eine Behandlung mittels T-Matrix und dem Äquivalent dazu für die Unordnung wünschenswert. Dies kann evtl. auch klären, welche der beiden in Abschnitt 5.10 vorgestellten theoretischen Möglichkeiten die bessere Beschreibung der Wirklichkeit liefert. Die fehlende Stabilitätsdiskussion in Abschnitt 5.10.1 muss hierbei nachgeholt werden, sobald klar ist, wie diese durchgeführt werden muss. Zufallspotentiale mit endlichen Korrelationslängen sollten untersucht werden.

Alle diese Untersuchungen können auch durch weitere theoretische Arbeiten geschehen, die auf anderen Methoden basieren. Falls eine Molekularfeldtheorie entwickelt werden kann, die ohne Näherung bandlückenfrei und konservierend ist, so wäre sie ein guter Kandidat dafür, dieses Problem abschließend zu behandeln.

Dabei kann untersucht werden, ob sich die parkondensierte Phase und die vorgeschlagene Glasphase unterscheiden. Diese Arbeit scheint darauf hinzudeuten, dass das Spektrum der parkondensierten Phase eine Bandlücke aufweist, während die echte Glasphase keine Bandlücke hat. Möglicherweise kann dies auch experimentell beobachtet werden. Experimentelle Realisierung und Messung der hier theoretisch behandelten Größen wäre ein wünschenswerter nächster Schritt.

Eine weitere theoretische Herausforderung besteht darin, auch die bisher quasi vernachlässigten RK_m und $R\Theta_m$ zu berücksichtigen. Dies erscheint insbesondere interessant für große R . Unter Umständen könnte das Problem

des seltsamen Verhaltens der superfluiden Dichte in Abschnitt 5.10.2 durch die Berücksichtigung dieser Terme korrigiert werden. Falls das möglich ist, ist zu vermuten, dass dieser Abschnitt, und nicht die Forderung nach einem bandlückenfreien Spektrum, die physikalische Wirklichkeit besser widerspiegelt.

Insbesondere experimentelle Arbeiten auf dem Gebiet der Zufallspotentiale ohne Gitter wären also in Zukunft sehr willkommen.

Kapitel 7

Danksagung

Zunächst möchte ich Prof. Dr. Dr. h.c. Robert Graham dafür danken, dass er diese Diplomarbeit betreut hat. Ebenfalls hierfür danke ich Priv.-Doz. Dr. habil. Axel Pelster. Beide Herren haben sich die Betreuung geteilt, und sie erklärten sich dazu bereit, diese Arbeit zu begutachten.

Danken möchte ich ebenfalls Dr. Konstantin Krutitsky, Dr. Patrick Navez und Prof. Dr. Vyacheslav Yukalov für anregende Diskussionen und Ideen.

Bei Problemen mit dem Computer konnte ich mich stets an Monika Motzko und Rüdiger Oberhage wenden, denen hierfür mein Dank gebührt.

Monika Motzko und Barbara Sacha konnte ich stets um Rat fragen, wenn es die Hürden der Bürokratie zu überspringen galt.

Teile dieser Arbeit wurden vom SFB/TR 12 gefördert. Auch hierfür möchte ich meinen Dank aussprechen.

Während meines Studiums haben mir viele Studenten und Professoren zur Seite gestanden. Diesen einzeln zu danken würde den Rahmen sprengen, jedoch möchte ich insbesondere meinen Mitstreitern bei den Praktika danken, Christian Haake, Birgit Hein, Tonci Nazlic, Patrick Skwara und Kristan Temme.

Ich danke auch den Gästen, Mitarbeitern und Professoren der Theoretischen Physik für die angenehme Atmosphäre während meiner Arbeit. Insbesondere sind dies Petr Braun, Julia Ernst, Giovanni Maria Falco, Robert Graham, Fritz Haake, Birgit Hein, Stefan Heusler, Konstantin Krutitsky, Andrea Lambert, Bernhard Mieck, Monika Motzko, Sebastian Müller, Patrick Navez, Rüdiger Oberhage, Axel Pelster, Barbara Sacha, Urs Schreiber, Stefan Thomae und Vyacheslav Yukalov.

Schließlich danke ich meiner Familie und meiner Freundin für all das, was sie für mich getan haben.

Anhang A

Poisson-Formel

In diesem Teil des Anhangs wird die Poisson-Formel hergeleitet, welche zur Auswertung von Matsubara-Reihen in der Vielteilchentheorie angewandt wird. Ausgangspunkt hierzu ist die sogenannte Kammdistribution

$$K(x) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta(x - m). \quad (\text{A.1})$$

Da sie periodisch ist, d.h.

$$K(x + z) = K(x); \quad z \in \mathbb{Z}, \quad (\text{A.2})$$

lässt sie sich im Distributionensinn in eine Fourierreihe zerlegen

$$K(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} K_n e^{-2\pi i n x}. \quad (\text{A.3})$$

Die Fourier-Koeffizienten K_n ergeben sich dabei durch Integration über eine Periode:

$$K_n = \int_{-1/2}^{1/2} dx K(x) e^{2\pi i n x}. \quad (\text{A.4})$$

Setzt man (A.1) in (A.4) ein, so erhält man $K_n = 1$. Daraus folgt die Distributionenidentität

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta(x - m) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-2\pi i n x}. \quad (\text{A.5})$$

Multipliziert man (A.5) mit einer Funktion $f(x)$ und integriert dann über die gesamte reelle Achse, so folgt hieraus die Poisson-Formel

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} f(m) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) e^{-2\pi i n x}. \quad (\text{A.6})$$

Spezialisiert man auf eine Funktion $f(m) = F(\omega_m)$, wobei $\omega_m = \frac{2\pi}{\hbar\beta} m$ die Matsubara-Frequenzen bezeichnen, so geht (A.6) über in

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} F(\omega_m) = \frac{\hbar\beta}{2\pi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_m F(\omega_m) e^{-i n \hbar\beta \omega_m}. \quad (\text{A.7})$$

Diese Formel hat eine grundlegende physikalische Bedeutung: Während auf der linken Seite der Formel (A.7) der Fall $m = 0$ bzw. $\omega_m = 0$ dem Hochtemperaturlimes $T \rightarrow \infty$ entspricht, entspricht auf der rechten Seite der Fall $n = 0$ dem Tieftemperaturlimes $T \rightarrow 0$. Die Formel dient also dazu, Hoch- und Tieftemperaturreihen ineinander umzuwandeln.

Anhang B

Robinson-Formel

Beim Phasenübergang zwischen Gas und BEC-Phase tauchen in der Regel polylogarithmische Funktionen auf, welche als Argument eine Exponentialfunktion aufweisen. Daher wird in diesem Abschnitt das Verhalten der polylogarithmischen Funktion mit der Fugazität $z = e^{\beta\mu}$ untersucht, also das Verhalten von

$$\zeta_{\nu}(z) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{z^m}{m^{\nu}} \quad (\text{B.1})$$

für negatives chemisches Potential μ im Grenzfall $\mu \nearrow 0$.

Hierzu wird die Distributionenidentität (A.5) mit einer Funktion $f(x)$ multipliziert und über das Intervall (ϵ, ∞) im Limes $\epsilon \searrow 0$ integriert. Daraus folgt eine gegenüber (A.6) modifizierte Poisson-Formel:

$$\sum_{m=1}^{\infty} f(m) = \int_0^{\infty} dx f(x) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{\infty} dx f(x) \cos(2\pi nx). \quad (\text{B.2})$$

(B.2) wird nun für $f(x) = x^{-\nu} e^{\beta\mu x}$ ausgewertet. Es treten die beiden folgenden zwei Integrale auf:

$$\int_0^{\infty} x^{-\nu} e^{\beta\mu x} dx = \Gamma(1-\nu)(-\beta\mu)^{\nu-1}, \quad (\text{B.3})$$

$$\int_0^{\infty} x^{-\nu} e^{\beta\mu x} \cos(2\pi nx) dx = \text{Re} \left\{ \Gamma(1-\nu)(-\beta\mu - 2\pi in)^{\nu-1} \right\}. \quad (\text{B.4})$$

Demnach geht (B.2) über in

$$\sum_{m=1}^{\infty} \frac{e^{\beta\mu m}}{m^{\nu}} = \Gamma(1-\nu)(-\beta\mu)^{\nu-1} + 2\Gamma(1-\nu) \sum_{n=1}^{\infty} \text{Re} \left\{ (-2\pi in)^{\nu-1} \left(1 + \frac{\beta\mu}{2\pi in} \right)^{\nu-1} \right\}. \quad (\text{B.5})$$

Im Grenzübergang $\mu \nearrow 0$ erhält man aus (B.5) zunächst

$$\sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m^{\nu}} = \Gamma(1-\nu) 2^{\nu} \pi^{\nu-1} \sin\left(\frac{\pi\nu}{2}\right) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^{1-\nu}}. \quad (\text{B.6})$$

Benutzt man die Identität [34, (8.334.3)] der Gamma-Funktion [57]

$$\Gamma(x)\Gamma(1-x) = \frac{\pi}{\sin(\pi x)}, \quad (\text{B.7})$$

so vereinfacht sich (B.6) zu

$$\sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m^{\nu}} = \frac{2^{\nu-1} \pi^{\nu}}{\Gamma(\nu) \cos(\pi\nu/2)} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^{1-\nu}}. \quad (\text{B.8})$$

(B.8) stellt eine Identität der Riemannschen Zeta-Funktion,

$$\zeta(\nu) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m^{\nu}}, \quad (\text{B.9})$$

dar [58], nämlich

$$\zeta(1 - \nu) = \frac{\Gamma(\nu) \cos(\pi\nu/2)}{2^{\nu-1} \pi^{\nu}} \zeta(\nu). \quad (\text{B.10})$$

Sie dient zur analytischen Fortsetzung der Riemannschen Zeta-Funktion.

Nach Klärung dieses Sachverhalts betrachte man erneut (B.5). Die linke Seite ist nach Definition die polylogarithmische Funktion $\zeta_{\nu}(e^{\beta\mu})$. Auf der rechten Seite kann man eine Taylor-Entwicklung nach Potenzen von $\beta\mu$ durchführen. Mit Beachtung der Definition der Riemannschen Zeta-Funktion (B.9) führt dies auf

$$\begin{aligned} \zeta_{\nu}(e^{\beta\mu}) &= \Gamma(1 - \nu)(-\beta\mu)^{\nu-1} \\ &+ 2\Gamma(1 - \nu) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\nu)(2\pi)^{\nu-1-k}}{k! \Gamma(\nu - k)} \cos\left[\frac{\pi}{2}(\nu - 1 - k)\right] (\beta\mu)^k \zeta(1 - \nu + k). \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

Unter Verwendung der Identitäten (B.7) und (B.10) führt dies auf

$$\zeta_{\nu}(e^{\beta\mu}) = \Gamma(1 - \nu)(-\beta\mu)^{\nu-1} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2(\beta\mu)^k}{k! \sin(\pi\nu)} \cos\left[\frac{\pi}{2}(\nu - 1 - k)\right] \cos\left[\frac{\pi}{2}(\nu - k)\right] \zeta(\nu - k). \quad (\text{B.12})$$

Schließlich benutzt man das trigonometrische Additionstheorem

$$2 \cos\left[\frac{\pi}{2}(\nu - 1 - k)\right] \cos\left[\frac{\pi}{2}(\nu - k)\right] = \cos\left[\frac{\pi}{2}(2\nu - 1)\right] + \cos\left[\frac{\pi}{2}(2k - 1)\right]. \quad (\text{B.13})$$

Setzt man diese Summe in (B.12) ein, so fällt der zweite Summand auf Grund der Nullstellen des Cosinus weg, während der Cosinus im ersten Summanden ein verschobener Sinus ist, der sich mit dem verbliebenen Sinus im Nenner kürzt.

Als Ergebnis erhält man die Robinson-Formel [59]:

$$\zeta_{\nu}(e^{\beta\mu}) = \Gamma(1 - \nu)(-\beta\mu)^{\nu-1} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\beta\mu)^k}{k!} \zeta(\nu - k). \quad (\text{B.14})$$

Der erste Summand $\Gamma(1 - \nu)(-\beta\mu)^{\nu-1}$ wird als singulärer Anteil bezeichnet, der andere als regulärer Anteil. Physikalisch wichtig wird diese Betrachtung an der Phasengrenze zwischen Gas und BEC. Diese entspricht einer grenzwertigen Betrachtung $\mu \nearrow 0$. Offensichtlich ist bei dieser Formel, dass im Falle $\nu \leq 1$ der singuläre Anteil eine bedeutende Rolle spielt, wobei im Falle geradzahlgiger $\nu \leq 1$ auf Grund der Singularitäten der Gamma-Funktion gesonderte Betrachtungen anzustellen sind, die an dieser Stelle aber nicht durchgeführt werden sollen.

Anhang C

Isotherme Kompressibilität

In der Thermodynamik ist die isotherme Kompressibilität definiert durch die negative Ableitung des Volumens eines physikalischen Systems nach dem Druck [26, (4.235)]:

$$\kappa_T = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_{T,N}. \quad (\text{C.1})$$

V bezeichnet hierbei das Volumen, p den Druck, T die Temperatur und N die Teilchenzahl. Das totale Differential der großkanonischen freien Energie dF lautet [27, Tabelle 3.1]:

$$dF = -S dT - p dV + \mu dN. \quad (\text{C.2})$$

S ist hierbei die Entropie und μ das chemische Potential. Aus (C.2) folgen unmittelbar die Zusammenhänge

$$\left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_{T,N} = -p \quad (\text{C.3})$$

und

$$\left(\frac{\partial F}{\partial N} \right)_{T,V} = \mu. \quad (\text{C.4})$$

Da dF das totale Differential einer mindestens zweifach stetig differenzierbaren Funktion ist, folgt daraus direkt eine Maxwell-Identität, nämlich

$$-\left(\frac{\partial p}{\partial N} \right)_{T,V} = \left(\frac{\partial \mu}{\partial V} \right)_{T,N}. \quad (\text{C.5})$$

Man benötigt außerdem noch die Gibbs-Duhem Relation [27, (3.1.24')]

$$S dT - V dp + N d\mu = 0. \quad (\text{C.6})$$

Daraus folgen die beiden Identitäten

$$N \left(\frac{\partial \mu}{\partial N} \right)_{T,V} = V \left(\frac{\partial p}{\partial N} \right)_{T,V} \quad (\text{C.7})$$

und

$$V \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_{T,N} = N \left(\frac{\partial \mu}{\partial V} \right)_{T,N}. \quad (\text{C.8})$$

Mittels (C.7) und (C.5) bekommt man

$$N \left(\frac{\partial \mu}{\partial N} \right)_{T,V} = -V \left(\frac{\partial \mu}{\partial V} \right)_{T,N}. \quad (\text{C.9})$$

Mit (C.8) folgt dann

$$N \left(\frac{\partial \mu}{\partial N} \right)_{T,V} = -\frac{V^2}{N} \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_{T,N}. \quad (\text{C.10})$$

Dies ist nach Definition (C.1) gleichbedeutend mit

$$N \left(\frac{\partial \mu}{\partial N} \right)_{T,V} = \frac{V}{N} \frac{1}{\kappa_T}. \quad (\text{C.11})$$

Dies kann man unter Verwendung der Definition der Teilchendichte $n = N/V$ umstellen und bekommt folgenden Ausdruck für die isotherme Kompressibilität:

$$\kappa_T = \frac{1}{n^2} \left(\frac{\partial n}{\partial \mu} \right)_{T,V}. \quad (\text{C.12})$$

Die isotherme Kompressibilität ist nun in einem stabilen System stets positiv, da eine Volumenverkleinerung ansonsten energetisch stets vorteilhaft ist: Das System würde kollabieren. Für das Bose-Kondensat ist diese Überlegung demnach wichtig, um einfach Stabilitätsaussagen machen zu können: Man betrachtet ein Diagramm, das alle möglichen Lösungen für Teilchendichte gegen das chemische Potential enthält. Falls man negative Steigung hat, so ist das System in diesem Bereich instabil.

Anhang D

Dimensionale Regularisierung

Bei der theoretischen Behandlung des Kondensats tauchen an vielen Stellen Integrale des Typs

$$I_{\nu,\mu}(a) = \int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon^\nu}{(\epsilon + a)^\mu} \quad (\text{D.1})$$

auf. In den Parametern ν und μ ist hierbei i.d.R. die Anzahl der Dimensionen D versteckt, während das Integral einem Integral über die Energie $\epsilon = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2M$ entspricht. Man stellt fest, dass sie oftmals in $D = 3$ Dimensionen nicht konvergent sind. Theoretisch muss man nun eine Renormierung geeigneter Messgrößen wie der Wechselwirkungskonstante oder der Unordnungsstärke durchführen. Dies ist mit großem mathematischen Aufwand verbunden, und in der Literatur für die Wechselwirkung bereits geschehen. Für die Unordnung fehlt eine solche Renormierungsvorschrift noch. Die Herleitung einer solchen geht allerdings über den Rahmen dieser Diplomarbeit hinaus. Praktischer und einfacher ist es, die Integrale dimensional zu regularisieren, da das Integral für $D \neq 3$ Dimensionen durchaus konvergent sein kann. Die Ergebnisse der korrekten Renormierungsmethode und dieser Regularisierungsmethode stimmen allerdings in allen betrachteten Fällen stets überein, und diese Methode wird weithin verwendet [5]. Diese Arten von Integralen müssen daher allgemein berechnet werden. Dazu schreibt man den Nenner unter Verwendung des Schwinger-Tricks

$$\frac{1}{a^x} = \frac{1}{\Gamma(x)} \int_0^\infty d\tau \tau^{x-1} e^{-a\tau} \quad (\text{D.2})$$

in ein Integral um, und erhält:

$$I_{\nu,\mu}(a) = \int_0^\infty d\epsilon \epsilon^\nu \frac{1}{\Gamma(\mu)} \int_0^\infty d\tau \tau^{\mu-1} e^{-\tau(\epsilon+a)}. \quad (\text{D.3})$$

Das Integral über ϵ lässt sich ausführen, und man erhält

$$I_{\nu,\mu}(a) = \frac{\Gamma(\nu + 1)}{\Gamma(\mu)} \int_0^\infty d\tau \tau^{\mu-\nu-2} e^{-\tau a}. \quad (\text{D.4})$$

Somit lässt sich auch das verbliebene Integral ausführen, sodass man schließlich auf die allgemeine Formel

$$I_{\nu,\mu}(a) = \frac{\Gamma(\nu + 1)\Gamma(\mu - \nu - 1)}{\Gamma(\mu)a^{\mu-\nu-1}}. \quad (\text{D.5})$$

kommt. Dieses letzte Ergebnis kann man für alle ν und μ , an denen die Gamma-Funktion sinnvoll definiert ist, als dimensional regularisiertes Ergebnis definieren, d.h. man setzt das Integral, welches für die betrachteten Parameter ν und μ möglicherweise nicht konvergent ist, analytisch auf die soeben angegebene Weise fort, hat also ein "Rezept" für die analytische Fortsetzung gefunden. Hierbei muss man jedoch Vorsicht walten lassen: Ist das Integral

deshalb nicht konvergent, weil der Integrand bei 0 nicht schnell genug abfällt, dann spricht man von Infrarot- (IR-) Divergenz. Diese beschreibt reale physikalische Effekte auf langen Skalen, was man daran sieht, dass die Energie ϵ proportional zum Quadrat der inversen Wellenlänge ist. In diesem Falle darf man nicht ohne weiteres regulieren, sondern muss die IR-Divergenzen einer gesonderten Betrachtung unterziehen. Im Falle von Ultraviolett- (UV-) Divergenzen sieht dies anders aus, da diese im Rahmen dieser Diplomarbeit durch ein zu einfaches Modell auf kurzen Längenskalen hervorgerufen werden, wobei insbesondere stark lokalisierte Wechselwirkung (d.h. proportional zur Delta-Distribution) oder räumlich unkorrelierte Zufallspotentiale zu nennen sind.

Falls das Integral nicht divergiert, so ist (D.5) das exakte Ergebnis der Berechnung des Integrals, also nicht die analytische Fortsetzung desselben.

Anhang E

Modifizierte Version der dimensionalen Regularisierung

In Abschnitt 5.10.2 tauchen bei der Berechnung der superfluiden Dichte Integrale des Typs

$$I_\nu(a, b) = \int_0^\infty dx \frac{x^\nu}{(x-a)(x+b)^2} \quad (\text{E.1})$$

auf, wobei gilt

$$a, b > 0. \quad (\text{E.2})$$

Die Integration führt also über den Pol $x = a$. Dieses Integral macht nur dann Sinn, wenn man es als Hauptwertintegral auffasst. In einer etwas umformulierten Weise ist dieses Integral

$$I_\nu(a, b) = -\frac{\partial}{\partial b} \int_0^\infty dx \frac{x^\nu}{(x-a)(x+b)}. \quad (\text{E.3})$$

Das Integral kann noch in zwei Integrale aufgespalten werden:

$$I_\nu(a, b) = -\frac{\partial}{\partial b} \int_0^\infty dx \left[\frac{x^\nu}{(x-a)} - \frac{x^\nu}{(x+b)} \right] \frac{1}{a+b}. \quad (\text{E.4})$$

Der zweite Summand kann mittels dimensionaler Regularisierung (D.5) behandelt werden. Der erste ändert jedoch sein Vorzeichen. Daher kann Formel (D.5) nicht auf ihn angewendet werden. Der Grund liegt darin, dass man den Schwinger-Trick (D.2) nicht anwenden darf, da der Nenner kein einheitliches Vorzeichen besitzt. In der Feldtheorie verwendet man daher den folgenden modifizierten Schwinger-Trick [35]:

$$\mathcal{P} \frac{1}{a} = \lim_{\epsilon \searrow 0} \text{Im} \int_0^\infty d\tau e^{-(\epsilon - ia)\tau}. \quad (\text{E.5})$$

Die Herleitung findet sich auf Seite 30. Verwendet man diese Vorschrift für den ersten Summanden, so folgt

$$\int_0^\infty dx \frac{x^\nu}{(x-a)} = \lim_{\epsilon \searrow 0} \text{Im} \int_0^\infty dx \int_0^\infty d\tau x^\nu e^{-(\epsilon - i(x-a))\tau}. \quad (\text{E.6})$$

Das Integral über x lässt sich nun ausführen.

$$\int_0^\infty dx \frac{x^\nu}{(x-a)} = \lim_{\epsilon \searrow 0} \text{Im} \int_0^\infty d\tau \frac{\Gamma(\nu+1)}{(-i)^{(\nu+1)}} \tau^{-(\nu+1)} e^{-(\epsilon+ia)\tau}. \quad (\text{E.7})$$

Auch dieses Integral lässt sich nun berechnen. Man erhält erneut eine Γ -Funktion.

$$\int_0^\infty dx \frac{x^\nu}{(x-a)} = \lim_{\epsilon \searrow 0} \text{Im} \frac{\Gamma(\nu+1)}{(-i)^{(\nu+1)}} \frac{\Gamma(-\nu)}{(\epsilon+ia)^{-\nu}}. \quad (\text{E.8})$$

Der Grenzübergang $\epsilon \searrow 0$ lässt sich nun durchführen, und man erhält

$$\int_0^\infty dx \frac{x^\nu}{(x-a)} = \text{Im} \frac{\Gamma(\nu+1) \Gamma(-\nu)}{(-i)^{(\nu+1)} (ia)^{-\nu}}. \quad (\text{E.9})$$

Der Imaginärteil ist nun

$$\int_0^\infty dx \frac{x^\nu}{(x-a)} = \Gamma(\nu+1) \Gamma(-\nu) a^\nu \sin\left(\frac{\pi}{2}(2\nu+1)\right). \quad (\text{E.10})$$

Damit folgt

$$I_\nu(a, b) = -\frac{\partial}{\partial b} \left[\Gamma(\nu+1) \Gamma(-\nu) a^\nu \sin\left(\frac{\pi}{2}(2\nu+1)\right) - \Gamma(\nu+1) \Gamma(-\nu) b^\nu \right] \frac{1}{a+b}. \quad (\text{E.11})$$

Die Berechnung der Ableitung ist nun trivial:

$$I_\nu(a, b) = \Gamma(\nu+1) \Gamma(-\nu) \left[\frac{\nu b^{\nu-1}}{a+b} + \frac{a^\nu}{(a+b)^2} \sin\left(\frac{\pi}{2}(2\nu+1)\right) - \frac{b^\nu}{(a+b)^2} \right]. \quad (\text{E.12})$$

Der Ausdruck ist als Hauptwertintegral zu verstehen. Für den Spezialfall $\nu = 3/2$, der konkret auftritt, bedeutet dies insbesondere

$$I_{3/2}(a, b) = \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) \Gamma\left(-\frac{3}{2}\right) \left[\frac{3b^{1/2}}{2(a+b)} - \frac{b^{3/2}}{(a+b)^2} \right]. \quad (\text{E.13})$$

Anhang F

Berechnung der Determinanten einer großen Matrix

Es soll die Determinante einer $2N \times 2N$ -Matrix berechnet werden, die folgende Struktur hat:

$$\begin{pmatrix}
 a+b & d+c & b & c & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & b & c \\
 \bar{d}+\bar{c} & \bar{a}+\bar{b} & \bar{c} & \bar{b} & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \bar{c} & \bar{b} \\
 b & c & a+b & d+c & \ddots & & & & & & \vdots & \vdots \\
 \bar{c} & \bar{b} & \bar{d}+\bar{c} & \bar{a}+\bar{b} & & \ddots & & & & & \vdots & \vdots \\
 \vdots & \vdots & \ddots & & \ddots & & \ddots & & & & \vdots & \vdots \\
 \vdots & \vdots & & \ddots & \ddots & & \ddots & & & & \vdots & \vdots \\
 \vdots & \vdots & & & \ddots & & \ddots & & & & \vdots & \vdots \\
 \vdots & \vdots & & & & \ddots & & & & & \vdots & \vdots \\
 \vdots & \vdots & & & & & \ddots & & & & \vdots & \vdots \\
 \vdots & \vdots & & & & & & \ddots & & & b & c \\
 \vdots & \vdots & & & & & & & \ddots & & \bar{c} & \bar{b} \\
 b & c & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & b & c & a+b & d+c \\
 \bar{c} & \bar{b} & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \bar{c} & \bar{b} & \bar{d}+\bar{c} & \bar{a}+\bar{b}
 \end{pmatrix}. \tag{F.1}$$

Dabei sind die genauen Einträge $a, b, c, d, \bar{a}, \bar{b}, \bar{c}, \bar{d}$ irrelevant, und sollen beliebig sein. Man kann erkennen, dass die Matrix eine $N \times N$ -Matrix mit Einträgen aus 2×2 -Matrizen ist. Sukzessive wird nun die $(i-1)$ -te Doppelspalte

von der i -ten abgezogen. Dabei läuft i von N bis 1, also rückwärts. Die sich dann ergebende Matrix lautet

$$\begin{pmatrix} a+b & d+c & -a & -d & 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 0 \\ \bar{d}+\bar{c} & \bar{a}+\bar{b} & -\bar{d} & -\bar{a} & 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 0 \\ b & c & a & d & -a & -d & \ddots & & & & \vdots & \vdots \\ \bar{c} & \bar{b} & \bar{d} & \bar{a} & -\bar{d} & -\bar{a} & & \ddots & & & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & 0 & 0 & a & d & -a & -d & \ddots & & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & 0 & 0 & \bar{d} & \bar{a} & -\bar{d} & -\bar{a} & & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \ddots & & \ddots & & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \ddots & & \ddots & & \ddots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & & \ddots & & \ddots & & -a & -d \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & & & \ddots & & \ddots & -\bar{d} & -\bar{a} \\ b & c & 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 0 & a & d \\ \bar{c} & \bar{b} & 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 0 & \bar{d} & \bar{a} \end{pmatrix}. \quad (\text{F.2})$$

Nun wird sukzessive die i -te Doppelzeile zu der $(i+1)$ -ten hinzuaddiert. Man erhält die Matrix

$$\begin{pmatrix} a+b & d+c & -a & -d & 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 0 \\ \bar{d}+\bar{c} & \bar{a}+\bar{b} & -\bar{d} & -\bar{a} & 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 0 \\ a+2b & d+2c & 0 & 0 & -a & -d & \ddots & & & & \vdots & \vdots \\ \bar{d}+2\bar{c} & \bar{a}+2\bar{b} & 0 & 0 & -\bar{d} & -\bar{a} & & \ddots & & & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & 0 & 0 & \ddots & & \ddots & & \ddots & & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & 0 & 0 & & \ddots & & \ddots & & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \ddots & & \ddots & & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \ddots & & \ddots & & \ddots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & & \ddots & & \ddots & & -a & -d \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & & & \ddots & & \ddots & -\bar{d} & -\bar{a} \\ a+Nb & d+Nc & 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \bar{d}+N\bar{c} & \bar{a}+N\bar{b} & 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{F.3})$$

Die Matrix ist nun nur noch dünn besetzt. Diese Matrixoperationen haben aber die Determinante der Matrix unverändert gelassen. Diese lässt sich nun einfach berechnen. Man erhält

$$\text{Det}G^{-1} = (a\bar{a} - d\bar{d})^{N-1} [(a+Nb)(\bar{a}+N\bar{b}) - (d+Nc)(\bar{d}+N\bar{c})]. \quad (\text{F.4})$$

Literaturverzeichnis

- [1] M.H. Anderson, J.R. Ensher, M.R. Matthews, C.E. Wieman, and E.A. Cornell, *Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor*, *Science* **269**, 198 (1995)
- [2] K.B. Davis, M.-O. Mewes, M.R. Andrews, N.J. van Druten, D.S. Durfee, D.M. Kurn, and W. Ketterle, *Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms* *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3969 (1995)
- [3] L.P. Pitaevskii and S. Stringari, *Bose-Einstein Condensation*, (Oxford University Press, Oxford, 2003)
- [4] C.J. Pethick and H. Smith, *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*, (Cambridge University Press, Cambridge, 2001)
- [5] J.O. Andersen, *Theory of the Weakly Interacting Bose Gas*, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 599 (2004)
- [6] F. Dalfovo, S. Giorgini, L.P. Pitaevskii, and S. Stringari, *Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases*, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 463 (1999)
- [7] P. Horak, J.Y. Courtois, and G. Grynberg, *Atom Cooling and Trapping by Disorder*, *Phys. Rev. A* **58**, 3953 (2000)
- [8] J.E. Lye, L. Fallani, M. Modugno, D.S. Wiersma, C. Fort, and M. Inguscio, *Bose-Einstein Condensate in a Random Potential*, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 070401 (2005)
- [9] D. Clément, A.F. Varón, M. Hugbart, J.A. Retter, P. Bouyer, L. Sanchez-Palencia, D.M. Gangardt, G.V. Shlyapnikov, and A. Aspect, *Suppression of Transport of an Interacting Elongated Bose-Einstein Condensate in a Random Potential*, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 170409 (2005)
- [10] T. Schulte, S. Drenkelforth, J. Kruse, W. Ertmer, J. Arlt, K. Sacha, J. Zakrzewski, and M. Lewenstein, *Routes towards Anderson-like localization of Bose-Einstein condensates in disordered optical lattices*, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 170411 (2005)
- [11] L. Fallani, J.E. Lye, V. Guarrera, C. Fort, M. Inguscio, *Onset of a Bose-Glass of Ultracold Atoms in a Disordered Crystal of Light*, *cond-mat/0603655*
- [12] R. Folman, P. Krüger, J. Schmiedmayer, J. Denschlag, and C. Henkel, *Microscopic Atom Optics: From Wires to an Atom Chip*, *Adv. At. Mol. Opt. Phys.* **48**, 263 (2002)
- [13] T. Schumm, J. Esteve, C. Figl, J.-B. Trebbia, C. Aussibal, H. Nguyen, D. Mailly, I. Bouchoule, C.I. Westbrook, and A. Aspect, *Atom Chips in the Real World: The Effects of Wire Corrugation*, *Eur. Phys. J. D* **32**, 171 (2005)

- [14] P. Krüger, L.M. Andersson, S. Wildermuth, S. Hofferberth, E. Haller, S. Aigner, S. Groth, and J. Schmiedmayer *Disorder Potentials near Lithographically Fabricated Atom Chips* cond-mat/0504686
- [15] L. Feenstra, L.M. Andersson, and J. Schmiedmayer, *Microtraps and Atom Chips: Toolboxes for cold atom physics*, *General Relativity and Gravitation* **36**, 2317 (2004)
- [16] G.E. Astrakharchik, J. Boronat, J. Casulleras, and S. Giorgini, *Superfluidity versus Bose-Einstein Condensation in a Bose Gas with Disorder*, *Phys. Rev. A* **66**, 023603 (2002)
- [17] G.K.S. Wong, P.A. Crowell, H.A. Cho, and J.D. Reppy, *Superfluid Critical Behavior in He⁴ filled Porous Media*, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 2410 (1990)
- [18] K. Huang and H.-F. Meng, *Hard-Sphere Bose Gas in Random External Potentials*, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 644 (1992)
- [19] S. Giorgini, L. Pitaevskii, and S. Stringari, *Effects of Disorder in a Dilute Bose Gas*, *Phys. Rev. B* **49**, 12938 (1994)
- [20] A.V. Lopatin and V.M. Vinokur, *Thermodynamics of the Superfluid Dilute Bose Gas with Disorder*, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 235503 (2002)
- [21] S.F. Edwards and P.W. Anderson, *Theory of Spin Glasses*, *J. Phys. F: Metal Phys.* **5**, 965 (1975)
- [22] C. Fort, L. Fallani, V. Guarrera, J.E. Lye, M. Modugno, D.S. Wiersma, and M. Inguscio, *Effect of Optical Disorder and Single Defects on the Expansion of a Bose-Einstein Condensate in a One-Dimensional Waveguide*, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 170410 (2005)
- [23] J.A. Hertz, L. Fleishman, and P.W. Anderson, *Marginal Fluctuations in a Bose Glass*, *Phys. Rev. Lett.* **43**, 942 (1979)
- [24] P. Nozieres and D. Saint James, *Particle vs. Pair Condensation in Attractive Bose Liquids*, *J. Phys. (Paris)* **43**, 1133 (1982)
- [25] R. Graham and A. Pelster, *Mean-Field Theory of Disordered Bosons*, cond-mat/0508306
- [26] W. Nolting, *Grundkurs Theoretische Physik 6, Statistische Physik*, 5. Auflage (Springer, Berlin 2004)
- [27] F. Schwabl, *Statistische Mechanik*, 2. Auflage (Springer, Berlin, 2004)
- [28] H. Kleinert, *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics, and Financial Markets*, Third Edition (World Scientific, Singapore, 2004);
Internet: http://www.physik.fu-berlin.de/kleinert/kleiner_reb3/3rded.html
- [29] K. Huang, *Statistical Mechanics*, Second Edition (John Wiley & Sons, New York, 1987)
- [30] H.T.C. Stoof, M. Bijlsma, and M. Houbiers, *Theory of Interacting Quantum Gases*, *J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol.* **101**, 443 (1996)
- [31] A.L. Fetter and J.D. Walecka, *Quantum Theory of Many Particle Systems* (McGraw-Hill Book Company, 1971)
- [32] T.T. Chou, C.N. Yang, and L.H. Yu, *Bose-Einstein Condensation of Atoms in a Trap*, *Phys. Rev. A* **55**, 4257 (1997)

- [33] H. Kleinert, A. Pelster, and B. Van den Bossche, *Recursive Graphical Construction of Feynman Diagrams and Their Weights in Ginzburg-Landau Theory*, Physica A **312**, 141 (2002)
- [34] I.S. Gradshteyn and I.M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series and Products*, Fifth Edition (Academic Press, London, 1994)
- [35] P. Arnold and B. Tomašik, T_c for Trapped Dilute Bose Gases: A Second-Order Result, Phys. Rev. A **64**, 053609 (2001)
- [36] Wolfram Research, Inc., *Mathematica Version 5.0*, Champaign, Illinois (USA) (2003)
- [37] H. Kleinert, *Five-Loop Critical Temperature Shift in Weakly Interacting Homogeneous Bose-Einstein Condensate*, Mod. Phys. Lett. B **17**, 1011 (2003)
- [38] Waterloo Maple, Inc., *Maple Version 9.5* Waterloo, Ontario (Canada) (2004)
- [39] J.C. Dainty (Editor), *Laser Speckle and Related Phenomena*, (Springer, Berlin 1975)
- [40] A. Griffin, *Conserving and Gapless Approximations for an Inhomogeneous Bose Gas at Finite Temperatures*, Phys. Rev. B **53**, 9341 (1996)
- [41] N.M. Hugenholtz and D. Pines, *Ground-State Energy and Excitation Spectrum of a System of Interacting Bosons*, Phys. Rev. **116**, 489 (1959)
- [42] M. Girardeau and R. Arnowitt, *Theory of Many-Boson Systems: Pair Theory*, Phys. Rev. **113**, 755 (1959)
- [43] H. Shi, and A. Griffin, *Finite-Temperature Excitations in a Dilute Bose-Condensed Gas*, Phys. Rep. **304**, 1 (1998)
- [44] N.P. Proukakis, K. Burnett, and H.T.C. Stoof, *Microscopic Treatment of Binary Interactions in the Nonequilibrium Dynamics of Partially Bose-Condensed Trapped Gases*, Phys. Rev. A **57**, 1230 (1998)
- [45] V.N. Popov and L.D. Faddeev, *An Approach to the Theory of the Low Temperature Bose Gas*, Sov. Phys. JETP **20**, 890 (1965)
- [46] V.N. Popov, *Green Functions and Thermodynamic Functions of a Non-Ideal Bose Gas*, Sov. Phys. JETP **20**, 1185 (1965)
- [47] V.N. Popov, *Functional Integrals in Quantum Field Theory and Statistical Physics* (Reidel, Dordrecht, 1983)
- [48] V.N. Popov *Functional Integrals and Collective Modes* (Cambridge University, New York, 1987)
- [49] P. Navez, untitled work, summarized in section 4.5.1, in preparation (2005)
- [50] V.I. Yukalov and H. Kleinert, *Gapless Hartree-Fock-Bogoliubov Approximation for Bose Gas*, in preparation (2005)
- [51] J. Goldstone, *Field Theories with 'Superconductor' Solutions*, Nuovo Cimento **19**, 154 (1961)
- [52] T.D. Lee and C.N. Yang, *Low-Temperature Behavior of a Dilute Bose System of Hard Spheres. I. Equilibrium Properties*, Phys. Rev. **112**, 1419 (1958)

- [53] H.J. Lewandowski, *Coherences and Correlations in an Ultracold Bose Gas*, Graduate School of the University of Colorado (2002)
Internet: <http://jilawww.colorado.edu/pubs/thesis/lewandowski/appA.pdf>
- [54] A. Pelster, *Bose-Einstein-Kondensation*, Vorlesungsskript, Universität Duisburg-Essen, 2004; Internet: http://www.theo-phys.uni-essen.de/tp/ags/pelster_dir/SS04/ss04.html
- [55] N. Read, S. Sachdev, and J. Ye, *Landau Theory of Quantum Spin Glasses of Rotors and Ising Spins*, Phys. Rev. B **52**, 384 (1995)
- [56] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions* (Cambridge University Press, Cambridge, 1999)
- [57] W.I. Smirnov, *Lehrgang der Höheren Mathematik*, Band III.2 (VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1963)
- [58] E.C. Titmarsh, *The Theory of the Riemann Zeta-Function* (Oxford Science Publications, Oxford, 1986)
- [59] J.E. Robinson, *Note on the Bose-Einstein Integral Functions*, Phys. Rev. **83**, 678 (1951)