

Kapitel 4

Schwach wechselwirkende Bose-Gase

In diesem Kapitel werden wir den Einfluss einer schwachen Wechselwirkung auf die Bose-Gase untersuchen. Unser Hauptaugenmerk richtet sich dabei auf die dabei verursachte Änderung der kritischen Temperatur, bei der die Bose-Einstein-Kondensation einsetzt. Um die dazu notwendigen theoretischen Konzepte in einem überschaubaren Rahmen einzuführen, beschränken wir uns in diesem Kapitel auf Beschreibungen der Bose-Gase in einem großkanonischen Ensemble. Weiterhin konzentrieren wir uns auf die Situation, in der Gasteilchen in einem genügend flachen harmonischen Fallen-Potential eingesperrt sind und sich somit innerhalb der semiklassischen Näherung beschreiben lassen.

Zunächst erinnern wir nochmals daran, dass die Bose-Einstein-Kondensation ein rein quantenstatistischer Effekt ist. Das heißt unter anderem, dass eine Wechselwirkung dafür nicht existentiell nötig ist. Es stellte vielmehr eine große Herausforderung an die Experimentatoren dar, die Fähigkeit bosonischer Systeme zur Bose-Einstein-Kondensation auszunutzen, noch bevor Wechselwirkungs-Effekte die Statistik zu stark verzerren oder gar dominieren. Genau deshalb wurde ein stark verdünntes Gas benutzt, bei dem die Wechselwirkung zwischen den einzelnen Gasteilchen weitestgehend vernachlässigbar ist. Dennoch lassen sich Wechselwirkungen auch bei starken Verdünnungen nicht ganz vermeiden, zuweilen aber auch ganz gezielt als Kontrollparameter einsetzen. Oft kann man die dabei zu untersuchenden Systeme als näherungsweise ideal betrachten, und die Wechselwirkungs-Effekte als schwache Störungen behandeln. Deshalb beschränken wir uns hier auf Untersuchungen der führenden Störungsordnung.

Das Ziel der Diskussion im Abschnitt 4.1 wird es sein, die Störungstheorie ausgehend von der in Kapitel 2 eingeführten Feldtheorie zu entwickeln. Solche statistischen Begriffe wie die Zustandssumme bzw. das großkanonische Potential werden hierbei auf wechselwirkende Systeme ausgeweitet. Außerdem kommt hier der Begriff der Selbstenergie hinzu, welcher im Rahmen der Renormierungstheorie eine wichtige Rolle spielt. Die störungstheoretische Vorgehensweise führt uns zu den so genannten Feynman-Diagrammen, welche anhand einiger weniger Feynman-Regeln aufgebaut werden. Damit lassen sich im ersten Abschnitt dieses Kapitels Diagramme des großkanonischen Potentials und der Greens-Funktion, sowie der Selbstenergie erzeugen. Diese Darstellungen basieren auf einem graphisch-rekursiven Verfahren und sind stark an diejenigen in den Publikationen [44,45] angelehnt.

Im Abschnitt 4.2 diskutieren wir die gängigen Wechselwirkungsmodelle. Dazu zählt in erster Linie das Modell der so genannten s-Wellen-Streuung, welche die niederenergetische Pseudopotential-Näherung zur Kontakt-Wechselwirkung darstellt. Außerdem wird das Modell durch eine Dipol-Dipol-Wechselwirkung erweitert, die für Systeme von Teilchen mit relativ starken magnetischen oder elektrischen Dipolmomenten relevant ist.

Im Abschnitt 4.3 wenden wir nun die vorher eingeführten feldtheoretischen Verfahren auf ein kontakt- und dipolar-wechselwirkendes bosonisches System an. Das Hauptaugenmerk gilt dabei der wechselwirkungsbedingten Verschiebung der kritischen Temperatur, welche wir in der semi-klassischen Näherung ausrechnen. Die Untersuchungen dieses Abschnitts wurden in den kürzlich erschienenen Publikationen [46,47] niederlegt und werden hier in einem etwas größeren Zusammenhang eingebunden.

4.1 Vielteilchentheorie mit schwacher Wechselwirkung

Die Darstellung schwach wechselwirkender Bose-Systeme im großkanonischen Ensemble beginnen wir in diesem Abschnitt mit einer feldtheoretischen Einführung. Dabei bauen wir auf die Untersuchungen wechselwirkungsfreier Systeme im Abschnitt 2.1 auf. Insbesondere beziehen wir uns dabei mehrfach auf das darin eingeführte Konzept der Funktionalintegration.

Unsere Untersuchungen beginnen wir im Unterabschnitt 4.1.1 mit den statistisch relevanten Begriffen der Zustandssumme und des großkanonischen Potentials sowie der Greens-Funktion, die auch als Propagator bezeichnet wird. Diese kennen wir bereits aus den Rechnungen für ideale Bose-Gase. Hier werden sie auf den Fall wechselwirkender Gase im Rahmen der Störungstheorie verallgemeinert. Zur selbstkonsistenten Verbesserung der rein störungstheoretischen Resultate verwendet man das Konzept der Renormierung, mit deren Hilfe lediglich einige wenige physikalische Systemparameter abgeändert werden müssen. Die zur Renormierung benötigte feldtheoretische Größe wird unter anderem durch die so genannte Selbstenergie geliefert, welche im Abschnitt 4.1.2 eingeführt wird.

Alle störungstheoretischen Beiträge zur Selbstenergie, zum Propagator oder zum großkanonischen Potential lassen sich in Form von Feynman-Diagrammen ausdrücken. Diese können mit Hilfe der im Unterabschnitt 4.1.3 eingeführten Feynman-Regeln aufgebaut werden. Im anschließenden Unterabschnitt 4.1.4 werden die Diagramme der besagten Größen inklusive ihrer relativen Gewichte nach einem graphisch rekursiven Verfahren erzeugt.

4.1.1 Feldtheoretische Begriffe

Das Ziel dieses Unterabschnittes ist es, die im Abschnitt 2.1 eingeführten feldtheoretische Begriffe für den Fall der Bose-Gase mit wechselwirkenden Teilchen zu verallgemeinern. Dabei beginnen wir

mit dem gegenüber (2.2) erweiterten Hamiltonian

$$\hat{H} \equiv \int d^3x \hat{a}^\dagger(\mathbf{x}) \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + V(\mathbf{x}) \right] \hat{a}(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \int d^3x d^3y \hat{a}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{a}^\dagger(\mathbf{y}) V^{(\text{int})}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \hat{a}(\mathbf{y}) \hat{a}(\mathbf{x}) , \quad (4.1)$$

wobei $V^{(\text{int})}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ für die Wechselwirkung zwischen zwei verschiedenen Teilchen an den Orten \mathbf{x} und \mathbf{y} steht. An dieser Stelle sei noch erwähnt, dass das Hamiltonian (4.1) bereits jetzt eine Näherung darstellt, in der Drei-, Vier- und alle höheren Viel-Teilchen-Wechselwirkungen weggelassen sind. Diese Näherung ist in den meisten gängigen Experimenten zur Bose-Einstein-Kondensation fern der Resonanzstreuungen berechtigt, da die dabei beteiligten Gase als stark verdünnt anzusehen sind. In diesen Fällen sind die simultanen Viel-Teilchen-Streuungen eher selten. Genau genommen führen solche Effekte häufig zu unerwünschten Rekombinationsprozessen in Kondensaten und sind schon daher so gering wie möglich zu halten. Zur eingehenden Diskussion dieser Frage sei auf das Lehrbuch von Huang [85] verwiesen. Hier soll nur kurz erwähnt werden, dass die darin geschilderten Abschätzungen keinen Einfluss der schwachen Viel-Teilchen-Wechselwirkungen auf die Terme der ersten störungstheoretischen Ordnung ergeben. Da wir uns in den weiteren Darstellungen tatsächlich nur mit dieser niedrigsten Störungsordnung beschäftigen werden, reichen die Zwei-Körper-Prozesse somit aus.

Nun schreiten wir zur Funktionalintegral-Formulierung der Zustandssumme (2.1). Diese ergibt sich in völliger Analogie zu der im Abschnitt 2.1 durchgeführten Rechnung als

$$Z_{GK} = \oint \mathcal{D}\psi^*(\mathbf{x}, \tau) \mathcal{D}\psi(\mathbf{x}, \tau) e^{-\left(\mathcal{A}^{(0)}[\psi^*, \psi] + \mathcal{A}^{(\text{int})}[\psi^*, \psi]\right)/\hbar} . \quad (4.2)$$

Das hierbei verwendete Funktionalintegral stellt dabei nach wie vor den Kontinuuumlimites der unendlichdimensionalen Integration (2.31) über die periodischen Feldkonfigurationen dar. Die letzteren werden mit Hilfe der euklidischen Wirkung gewichtet, die allerdings in Anwesenheit der Wechselwirkung eine zusammengesetzte Größe darstellt bestehend aus dem wechselwirkungsfreien Anteil

$$\mathcal{A}^{(0)}[\psi^*, \psi] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^3x \psi^*(\mathbf{x}, \tau) \left\{ \hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta + V(\mathbf{x}) - \mu \right\} \psi(\mathbf{x}, \tau) , \quad (4.3)$$

den wir bereits aus (2.33) kennen, und dem neuen Zwei-Teilchen-Wechselwirkungsterm

$$\mathcal{A}^{(\text{int})}[\psi^*, \psi] = \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^3x d^3y |\psi(\mathbf{y}, \tau)|^2 V^{(\text{int})}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) |\psi(\mathbf{x}, \tau)|^2 . \quad (4.4)$$

Für spätere Untersuchungen empfiehlt es sich, den freien Anteil (4.3) in einer etwas veränderten Form als

$$\mathcal{A}^{(0)}[\psi^*, \psi] = \hbar \int_0^{\hbar\beta} d\tau d\tau' \int d^3x d^3y \psi^*(\mathbf{y}, \tau') G^{(0)-1}(\mathbf{y}, \tau'; \mathbf{x}, \tau) \psi(\mathbf{x}, \tau) \quad (4.5)$$

zu schreiben, wobei die bilokale Größe $G^{(0)-1}$ den so genannten Integralkern

$$G^{(0)-1}(\mathbf{y}, \tau'; \mathbf{x}, \tau) \equiv \frac{1}{\hbar} \delta(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \delta(\tau' - \tau) \left\{ \hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta + V(\mathbf{x}) - \mu \right\} \quad (4.6)$$

darstellt. Der wechselwirkende Term lässt sich ebenfalls als

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^{(\text{int})}[\psi^*, \psi] &= \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 d\tau_4 \int d^3x_1 d^3x_2 d^3x_3 d^3x_4 V^{(\text{int})}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2 | \mathbf{x}_3, \tau_3; \mathbf{x}_4, \tau_4) \\ &\quad \times \psi^*(\mathbf{x}_1, \tau_1) \psi(\mathbf{x}_2, \tau_2) \psi^*(\mathbf{x}_3, \tau_3) \psi(\mathbf{x}_4, \tau_4) \end{aligned} \quad (4.7)$$

umschreiben mit dem Folgenden Vierertensor der Wechselwirkung:

$$\begin{aligned} V^{(\text{int})}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2 | \mathbf{x}_3, \tau_3; \mathbf{x}_4, \tau_4) &\equiv \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \delta(\mathbf{x}_3 - \mathbf{x}_4) V^{(\text{int})}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_3) \\ &\quad \times \delta(\tau_1 - \tau_2) \delta(\tau_1 - \tau_3) \delta(\tau_1 - \tau_4) . \end{aligned} \quad (4.8)$$

Neben der Zustandssumme (2.1) können wir hier noch die Greensche Funktion (2.49) untersuchen. Diese auch als voller Propagator bezeichnete Zwei-Punkt-Funktion ergibt sich unter Berücksichtigung der Wechselwirkung in einer zu (2.59) analogen Form als

$$\mathbf{G}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) = \frac{1}{Z_{GK}} \oint \mathcal{D}\psi^*(\mathbf{x}, \tau) \mathcal{D}\psi(\mathbf{x}, \tau) \psi(\mathbf{x}_1, \tau_1) \psi^*(\mathbf{x}_2, \tau_2) e^{-(\mathcal{A}^{(0)}[\psi^*, \psi] + \mathcal{A}^{(\text{int})}[\psi^*, \psi])/\hbar} . \quad (4.9)$$

Um die störungstheoretischen Entwicklungen der Zustandssumme (4.2) und des vollen Propagators (4.9) zu erhalten, nehmen wir ferner an, dass der Wirkungsanteil (4.4) klein ist, d.h. $\mathcal{A}^{(\text{int})}/\hbar \ll 1$. Damit erhalten wir für die Zustandssumme

$$Z_{GK} = Z_{GK}^{(0)} \left\{ 1 - \frac{1}{Z_{GK}^{(0)}} \oint \mathcal{D}\psi^*(\mathbf{x}, \tau) \mathcal{D}\psi(\mathbf{x}, \tau) \left[\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}^{(\text{int})}[\psi^*, \psi] + \dots \right] e^{-\mathcal{A}^{(0)}[\psi^*, \psi]/\hbar} \right\} , \quad (4.10)$$

wobei der erste Term $Z_{GK}^{(0)}$ den wechselwirkungsfreien Beitrag (2.32) repräsentiert, den wir hier zur besseren Unterscheidung von der vollen Zustandssumme (4.2) mit dem oberen Index "(0)" versehen haben. Die weiteren Terme repräsentieren störungstheoretische Beiträge erster und höherer Ordnungen. Unmittelbar aus der Zustandssumme (4.2) lässt sich das großkanonische Potential

$$\mathcal{F}_{GK} \equiv -\frac{1}{\beta} \ln Z_{GK} = \mathcal{F}_{GK}^{(0)} - \frac{1}{\beta} W^{(\text{int})} \quad (4.11)$$

bestimmen. Der erste Term auf der rechten Seite $\mathcal{F}_{GK}^{(0)} \equiv -\ln Z_{GK}^{(0)}/\beta$ entspricht genau dem wechselwirkungsfreien großkanonischen Potential aus Abschnitt 2.1.4. Die dimensionslose Größe $W^{(\text{int})}$ stellt dabei den wechselwirkenden Anteil dar, welcher im Unterabschnitt 4.1.4 noch genauer bestimmt wird. Es ist interessant an dieser Stelle zu bemerken, dass die störungstheoretische Entwicklung des großkanonischen Potentials einer Kumulantenentwicklung entspricht, im Gegensatz zu der Momentenentwicklung der Zustandssumme. Nur die erste der beiden hat die angenehme Eigenschaft, in jeder Entwicklungsordnung extensive Ausdrücke zu liefern, d.h. proportional zur Teilchenzahl N zu sein. Damit ergeben sie auch im thermodynamischen Limes noch sinnvolle Resultate [51, Kapitel 3].

Zur störungstheoretischen Entwicklung des vollen Propagators (4.9) brauchen wir neben der Entwicklung des Funktionalintegrals noch die Entwicklung der Zustandssumme im Nenner. Bis zur führenden Entwicklungsordnung lässt sich dieser als

$$\mathbf{G}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) = G^{(0)}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) + \dots \quad (4.12)$$

ausschreiben. Der erste Summand stellt dabei den wechselwirkungsfreien Propagator (2.59) aus Abschnitt 2.1.3 dar, den wir hier mit dem überstehenden Index “(0)” versehen haben, um den Unterschied zum vollen Propagator hervorzuheben. Der explizite Ausdruck für den Term nächster Ordnung liesse sich zwar direkt angeben, wäre aber in dieser Form noch wenig aufschlussreich. Aus diesem Grund verweisen wir auf die störungstheoretische Entwicklung dieser Größe im Unterabschnitt 4.1.4.

4.1.2 Selbstenergie

Bei einer störungstheoretischen Entwicklung, wie sie z.B. für die Zustandssumme (4.10) durchgeführt wurde, war es von entscheidender Bedeutung, dass der Störungsterm klein ist. Dennoch ist dies auch in unseren Rechnungen zum verdünnten Bose-Gas nicht immer gewährleistet, und so müssen die Reihen auf eine angemessene Art resummiert werden. Eine relativ einfache Methode, mit der sich eine bestimmte Klasse von störungstheoretischen Termen zusammenfassen lässt, wird durch die so genannte Renormierung gegeben. Deren wichtigster Bestandteil ist die Selbstenergie, welche den mittleren Einfluss der Wechselwirkung auf die Parameter beschreibt, die in der wechselwirkungsfreien Theorie vorkommen, wie z.B. Masse, Frequenz und chemisches Potential.

Zur konkreten Diskussion dieser Größe bemerken wir zunächst die folgende wichtige Differentialgleichung für den freien Propagator (2.68):

$$\begin{aligned} \left\{ \hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\mathbf{x}} + V(\mathbf{x}) - \mu \right\} G^{(0)}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{y}, \tau') &= \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{y}) \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{2\pi m(\tau-\tau')/\hbar\beta} \\ &= \hbar \delta(\mathbf{x}-\mathbf{y}) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(\tau-\tau' + n\hbar\beta) . \end{aligned} \quad (4.13)$$

Die erste Gleichung ergibt sich unmittelbar aus der Eigenwertgleichung (2.35). Für die zweite wird die Entkopplung der Indizes \mathbf{k} und m ausgenutzt, und es werden Vollständigkeits-Relationen (2.36) und (2.39) angewendet. Weiterhin ergibt sich damit für die Imaginärzeiten $\tau', \tau'' \in (0; \hbar\beta]$ die folgende Beziehung zwischen dem Integralkern (4.6) und dem freien Propagator:

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^3x G^{(0)-1}(\mathbf{z}, \tau''; \mathbf{x}, \tau) G^{(0)}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{y}, \tau') = \delta(\mathbf{z}-\mathbf{y}) \delta(\tau''-\tau') . \quad (4.14)$$

Daraus sehen wir, dass der Integralkern zum freien Propagator reziprok im funktionalen Sinne ist, wodurch auch seine Bezeichnung als $G^{(0)-1}$ gerechtfertigt ist. Nun gehen wir einen Schritt weiter und definieren den vollen Integralkern der wechselwirkenden Theorie \mathbf{G}^{-1} als die funktionale Umkehrung des vollen Propagators gemäß der Gleichung

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^3x \mathbf{G}^{-1}(\mathbf{z}, \tau''; \mathbf{x}, \tau) \mathbf{G}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{y}, \tau') = \delta(\mathbf{z}-\mathbf{y}) \delta(\tau''-\tau') . \quad (4.15)$$

Dieser volle Integralkern \mathbf{G}^{-1} spielt nun für Theorien mit Wechselwirkung eine ähnliche Rolle wie der freie Integralkern $G^{(0)-1}$ in wechselwirkungsfreien Theorien. Die Differenz zwischen den beiden

$$\Sigma(\mathbf{y}, \tau'; \mathbf{x}, \tau) = G^{(0)-1}(\mathbf{y}, \tau'; \mathbf{x}, \tau) - \mathbf{G}^{-1}(\mathbf{y}, \tau'; \mathbf{x}, \tau) \quad (4.16)$$

beschreibt den reinen Effekt der Wechselwirkung und wird nun im Folgenden als die Selbstenergie bezeichnet.

Um die Bedeutung dieser Größe besser zu verstehen, formen wir die Identität (4.16) noch etwas um. Dafür erweitern wir sie mit dem vollen Propagator $\mathbf{G}(\mathbf{z}_1, \tau_1; \mathbf{y}, \tau')$ von links und dem freien Propagator $G^{(0)}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{z}_2, \tau_2)$ von rechts und integrieren die Zwischenpunkte (x, τ) und (\mathbf{y}, τ') aus. Damit ergibt sich nach (4.14) und (4.15) für den vollen Propagator

$$\begin{aligned} \mathbf{G}(\mathbf{z}_1, \tau_1; \mathbf{z}_2, \tau_2) &= G^{(0)}(\mathbf{z}_1, \tau_1; \mathbf{z}_2, \tau_2) \\ &+ \int_0^{\hbar\beta} d\tau d\tau' \int d^3x d^3y \mathbf{G}(\mathbf{z}_1, \tau_1; \mathbf{y}, \tau') \Sigma(\mathbf{y}, \tau'; \mathbf{x}, \tau) G^{(0)}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{z}_2, \tau_2) . \end{aligned} \quad (4.17)$$

Das ist die berühmte Dyson-Gleichung für die Greens-Funktionen [95]. Demnach kann die Propagation (in Imaginärzeit wie in Realzeit) eines wechselwirkenden Teilchens auf zwei verschiedene Weisen verlaufen. Bei der ersten ist es die freie Propagation ohne jegliche Wechselwirkungsprozesse, welche durch den ersten Summanden beschrieben ist. Bei der zweiten läuft ein Teilchen zuerst frei, bis es an einem Zwischenpunkt in einem Wechselwirkungsprozess teilnimmt. Danach setzt es seine Bewegung weiter fort, vielleicht völlig frei, vielleicht aber auch nur bis zum nächsten Wechselwirkungsvorgang. Nun wird jeder dieser einzelnen nicht trivialen Vorgänge durch die Selbstenergie (4.16) beschrieben. Dabei handelt es sich jedoch nicht um die Wechselwirkungsprozesse zwischen zwei verschiedenen Teilchen, sondern lediglich um die Wechselwirkung eines einzelnen Teilchens mit seiner Umgebung, welche durch die Präsenz des Teilchens selbst polarisiert wird. Effektiv gesehen, wirkt das Teilchen dabei mittels umgebender Felder auf sich selbst, woher auch die Bezeichnung “Selbstenergie” abstammt. Bei einer näheren Betrachtung der Dyson-Gleichung (4.17) fällt ihr selbstkonsistenter Charakter auf, denn der volle Propagator tritt darin auf beiden Seiten auf. Würde man also die Selbstenergie exakt kennen, so liesse sich der Propagator damit selbstkonsistent berechnen. Das ist ein wirklich großer Vorteil gegenüber dem rein störungstheoretischen Ausdruck, den wir direkt aus der Definitionsgleichung (4.9) gewinnen können. Und auch wenn man nur einige wenige Selbstenergie-Terme explizit angeben kann, so wird dadurch eine ganze Klasse von störungstheoretischen Termen des Propagators beschrieben. Genau das geschieht beispielsweise in der Hartree-Fock-Näherung, die wir im Abschnitt 4.1.5 noch behandeln werden.

Es lässt sich ferner noch eine weitere Interpretation der Renormierung angeben. Da die Propagation eines Teilchens unter Einfluss seiner Wechselwirkungen mit der Umgebung geschieht, ändern sich effektiv seine Eigenschaften. Man spricht in diesem Zusammenhang von einem “angezogenen” Teilchen im Gegensatz zu einem “nackten” Teilchen, das uns in der freien Theorie begegnet. Ursprünglich kommt die Renormierung aus der Quantenelektrodynamik (QED), wo man z.B. ein Elektron zunächst als ein Punktteilchen betrachtet und feststellt, dass seine Gesamtenergie damit unendlich wäre. Da jedoch ein Elektron im physikalischen Vakuum vom elektromagnetischen Feld umgeben ist, wird eine ebenfalls unendliche Energie für die Polarisation des Vakuums verbraucht. Die beiden durch Lokalität der QED entstandenen Unendlichkeiten kompensieren sich gegenseitig und ergeben ein renormiertes “angezogenes” Teilchen, dessen Energie und sonstige Eigenschaften vom real messbaren Elektron bekannt sind. Die Physik bei ultrakurzen Abständen ist uns dabei im Detail zwar nicht bekannt, in allen renormierbaren Theorien (un nur mit solchen haben wir

hier zu tun) spielt diese Ignoranz jedoch keine Rolle. Übertragen auf ein Gas-Atom oder Molekül heißt das natürlich nicht, dass es in einem völlig wechselwirkungsfreien Gas singuläre Eigenschaften eines Punktteilchens besitzt. Diese sind bereits durch die Präsenz des physikalischen Vakuums beseitigt. In einem wechselwirkenden Gas stellt dennoch ein durch Selbstenergie-Effekte angezogenes Gasteilchen einen besseren Ausgangspunkt für weitere theoretische Untersuchungen dar als das nackte Teilchen der freien Theorie. Interessant ist in diesem Zusammenhang auch noch zu wissen, wie die einzelnen Selbstenergie-Beiträge aussehen. Dazu werden sie im Unterabschnitt 4.1.5 in den beiden niedrigsten störungstheoretischen Ordnungen mit Hilfe von Feynman-Diagrammen graphisch dargestellt.

4.1.3 Einführung in die Diagrammtechnik

In diesem Unterabschnitt führen wir einige Abkürzungen ein, die das weitere Vorgehen bei der störungstheoretischen Entwicklung der Selbstenergie (4.16), des Propagators (4.9) sowie des großkanonischen Potentials (4.11) etwas erleichtern. Weiterhin lassen sich die störungstheoretischen Ausdrücke vereinfachen, indem man sie in Form von Diagrammen darstellt. Die dazu notwendigen graphischen Elemente sowie Anwendungsregeln werden ebenfalls erklärt.

Wir beginnen hier mit kleinen Abänderungen der Notation, welche die weitere Buchhaltung erleichtern sollen. Da wir es weiterhin nur mit einer endlichen Anzahl von kontinuierlichen Raum-Imaginärzeit-Punkten zu tun haben werden, bietet es sich an, sie mit einem einzigen Index zu bezeichnen. Damit ergeben sich z.B. die folgenden Abkürzungen:

$$\psi_i \equiv \psi(\mathbf{x}_i, \tau_i) \quad , \quad \int_i \equiv \int_0^{\hbar\beta} d\tau_i \int d^3x_i \quad . \quad (4.18)$$

Für den Integralkern (4.6) sowie den Vierertensor (4.8) ergibt sich damit

$$G_{ij}^{(0)-1} \equiv G^{(0)-1}(\mathbf{x}_i, \tau_i; \mathbf{x}_j, \tau_j) \quad , \quad V_{ij,kl}^{(\text{int})} \equiv V^{(\text{int})}(\mathbf{x}_i, \tau_i; \mathbf{x}_j, \tau_j | \mathbf{x}_k, \tau_k; \mathbf{x}_l, \tau_l) \quad . \quad (4.19)$$

Die weiteren Größen wie Propagatoren oder die Selbstenergie werden in völliger Analogie dazu als $G_{ij}^{(0)}$, \mathbf{G}_{ij} bzw. Σ_{ij} bezeichnet.

Die störungstheoretischen Ausdrücke aller für uns interessanten Größen werden nun mit Hilfe der freien Propagatoren $G_{ij}^{(0)}$ und der Wechselwirkungen $V_{ij,kl}^{(\text{int})}$ dargestellt. Da es jedoch sehr schwer ist, zwischen den verschiedenen Indexkombinationen zu unterscheiden, die auftreten können, ziehen wir die diagrammatische Darstellungstechnik zu Rate. Diese wurde in der relativistischen Quantenfeldtheorie von Feynman etabliert, und daher werden solche graphischen Darstellungen als Feynman-Diagramme bezeichnet. Die Vorschriften, nach denen sich solche Diagramme bilden lassen, heißen weiterhin Feynman-Regeln. Sie variieren stark je nach Theorie und sind auch sonst an keine fest vorgeschriebenen Strukturen gebunden. So werden auch in unseren weiteren Darstellungen der Viel-Teilchen-Theorie Regeln verwendet, die z.B. von den in [48,50] benutzten etwas abweichen. Diese Regeln ermöglichen neben den Darstellungen der Vakuumdiagramme des großkanonischen Potentials auch eine konsistente Konstruktion der Selbstenergie-Diagramme. Sie wurden

zuerst in der skalaren ϕ^4 -Theorie in [45,96] verwendet und in [44] auf die Viel-Teilchen-Theorie verallgemeinert. Das Kernstück bildet dabei das graphische Element der Vierer-Wechselwirkung in Form zweier Vertizes, die miteinander durch eine geschlängelte Wechselwirkungslinie verbunden sind:

$$-\frac{1}{\hbar} V_{12,34}^{(\text{int})} \equiv \begin{array}{c} 2 \quad 3 \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{---} \\ \diagup \quad \diagdown \\ 1 \quad 4 \end{array} . \quad (4.20)$$

Ein weiteres Element ist der freie Propagator, der durch eine einfache gerichtete Linie dargestellt wird:

$$G_{12}^{(0)} \equiv 1 \longleftarrow 2 . \quad (4.21)$$

Der freie Integralkern $G^{(0)-1}$ aus (4.6) sowie sein wechselwirkendes Gegenstück \mathbf{G}^{-1} erhalten keine eigenen graphischen Bezeichnungen, aber dafür die Selbstenergie $\Sigma_{12} = G_{12}^{(0)-1} - \mathbf{G}_{12}^{-1}$ in Form eines Doppelkreises mit zwei offenen Stummeln

$$\Sigma_{12} \equiv 1 \longleftarrow \bigcirc \longleftarrow 2 . \quad (4.22)$$

Auch der volle Propagator bekommt seine Bezeichnung, die in Analogie zum freien Propagator (4.21) eine gerichtete Linie darstellt, diesmal jedoch eine doppelte:

$$\mathbf{G}_{12} \equiv 1 \longleftarrow\!\!\!\longleftarrow 2 . \quad (4.23)$$

Die graphischen Elemente (4.20)–(4.23) lassen sich auf verschiedene Weise kombinieren, wichtig ist dabei nur, dass die Linien an die Stummeln zu verbinden sind, nicht aber an die anderen Linien. So werden z.B. die Vierer-Wechselwirkung und der freie Propagator durch die folgende Anklebevorschrift aneinander geheftet:

$$-\frac{1}{\hbar} \int_4 V_{12,34}^{(\text{int})} G_{45}^{(0)} \equiv \begin{array}{c} 2 \quad 3 \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{---} \\ \diagup \quad \diagdown \\ 1 \quad 4 \end{array} \begin{array}{c} 4 \longleftarrow 5 \end{array} \equiv \begin{array}{c} 2 \quad 3 \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{---} \\ \diagup \quad \diagdown \\ 1 \quad 5 \end{array} . \quad (4.24)$$

Auch mit der Selbstenergie lässt sich eine einfache Linie (4.21) verbinden, wie im übrigen auch die Doppellinie (4.23):

$$\int_2 \mathbf{G}_{12} \Sigma_{23} = 1 \longleftarrow\!\!\!\longleftarrow \bigcirc \longleftarrow 3 \quad , \quad \int_2 \Sigma_{12} G_{23}^{(0)} = 1 \longleftarrow \bigcirc \longleftarrow 3 . \quad (4.25)$$

Eine weitere wichtige graphische Operation ist die Linienamputation, die zur Illustration der Funktionalableitung $\delta/\delta G^{(0)}$ dienen soll. Dazu stellen wir zunächst die folgende Identität fest:

$$\frac{\delta G_{12}^{(0)}}{\delta G_{34}^{(0)}} \equiv \frac{\delta 1 \longleftarrow 2}{\delta 3 \longleftarrow 4} = \delta_{13} \delta_{42} \quad , \quad (4.26)$$

welche die Funktionalableitungs-Vorschrift widerspiegelt. Die Deltas $\delta_{ij} \equiv \delta(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \delta(\tau_i - \tau_j)$ stellen dabei lediglich die Indexvertauschungs-Operatoren dar, denn es gilt $\int_3 \delta_{13} G_{32}^{(0)} = G_{12}^{(0)}$ bzw. $\int_5 \delta_{15} V_{5234} = V_{1234}$. Wendet man also die Operation $\delta/\delta G_{34}^{(0)}$ auf eine Linie $G_{12}^{(0)}$ an, so wird sie nach (4.26) gelöscht (amputiert) und anschließend werden die Indizes (1,2) gegen (3,4) ausgetauscht.

Bei einigen Rechnungen kann auch die Funktionalableitung nach dem Integralkern $\delta/\delta G^{(0)-1}$ vorkommen. Diese lässt sich jedoch auf die bereits bekannte Funktionalableitung $\delta/\delta G^{(0)}$ zurückführen. Dazu benötigen wir erstens die Kettenregel der Funktionalableitungen

$$\frac{\delta}{\delta G_{12}^{(0)-1}} = \int_{34} \frac{\delta G_{34}^{(0)}}{\delta G_{12}^{(0)-1}} \frac{\delta}{\delta G_{34}^{(0)}} . \quad (4.27)$$

Zweitens stehen uns die Funktionalumkehrungen (4.14) und (4.15) zur Verfügung, die wir mit (4.18), (4.19) und den dazu analogen Abkürzungen als

$$\int_3 G_{13}^{(0)-1} G_{32}^{(0)} = \delta_{12} \quad , \quad \int_3 \mathbf{G}_{13}^{-1} \mathbf{G}_{32} = \delta_{12} \quad (4.28)$$

schreiben. Mit der Funktionalableitungs-Vorschrift $\delta(\delta_{12})/\delta G_{34}^{(0)-1} = 0$ ergibt sich nun aus der ersten Gleichung (4.28) $\delta G_{34}^{(0)}/\delta G_{12}^{(0)-1} = -G_{31}^{(0)} G_{24}^{(0)}$ und nach (4.27) somit auch

$$\frac{\delta}{\delta G_{12}^{(0)-1}} = - \int_{34} G_{31}^{(0)} G_{24}^{(0)} \frac{\delta}{\delta G_{34}^{(0)}} . \quad (4.29)$$

Manchmal kommt die Linienamputation zusammen mit anschließendem Anheften einer Linie an beide hinterbliebenen Stummel vor, also als

$$\hat{L} \equiv \int_{12} G_{12}^{(0)} \frac{\delta}{\delta G_{12}^{(0)}} . \quad (4.30)$$

Diese Operation entspricht dem Linienzähl-Operator. Eine einzelne Linie lässt er nämlich unberührt, denn wegen (4.26) gilt

$$\hat{L} G_{34}^{(0)} \equiv \int_{12} G_{12}^{(0)} \frac{\delta G_{34}^{(0)}}{\delta G_{12}^{(0)}} = G_{34}^{(0)} . \quad (4.31)$$

Bei einem Graphen mit N Linien wirkt der Operator \hat{L} auf jede Linie genau einmal und belässt diese entsprechend der Gleichung (4.31) in ihrem ursprünglichen Zustand. Da dies aber N mal angewandt wird, wird der ursprüngliche Graph N -fach kopiert und es gilt

$$\hat{L} \langle \text{Graph mit } N \text{ Linien} \rangle = N \times \langle \text{Graph mit } N \text{ Linien} \rangle . \quad (4.32)$$

Mit anderen Worten zählt der Operator \hat{L} in der Tat die Linien eines Graphen.

4.1.4 Rekursion für Selbstenergie

In diesem Abschnitt werden wir die Feynman-Diagramme der Selbstenergie, des Propagators sowie des großkanonischen Potentials bestimmen. Dafür benutzen wir die Schwinger-Dyson-Gleichung [97] der Vielteilchen-Theorie, die wir aus allgemeingültigen Überlegungen herleiten werden. Diese Gleichung hat die Form einer Selbstkonsistenz-Gleichung und ergibt zusammen mit der Dyson-Gleichung für die Greens-Funktion (4.17) ein geschlossenes Gleichungs-System, aus dem sich alle

Feynman-Diagramme der Selbstenergie mit den dazugehörigen Gewichten rekursiv bestimmen lassen. Die Feynman-Graphen der Greens-Funktion (des Propagators) ergeben sich dabei als Nebenprodukt. Dieser Abschnitt wird anschließend durch Erzeugung der so genannten Vakuum-Diagramme des großkanonischen Potentials komplettiert. Sie lassen sich aus den Graphen der Selbstenergie und des Propagators zusammensetzen und erfordern auf diese Weise keine eigenständige Rekursionsgleichung.

Zur Vorbereitung weiterer Rechnungen dieses Abschnitts beginnen wir mit der Wirkung der Vielteilchen-Theorie. Sie setzt sich additiv aus dem wechselwirkungsfreien Anteil (4.5) und dem Anteil der Wechselwirkung (4.7) zusammen und ist mit den Abkürzungen (4.18) und (4.19) als

$$\mathcal{A}[\psi^*, \psi] = \hbar \int_{12} G_{12}^{(0)-1} \psi_1^* \psi_2 + \frac{1}{2} \int_{1234} V_{12,34}^{(\text{int})} \psi_1^* \psi_2 \psi_3^* \psi_4 \quad . \quad (4.33)$$

zu schreiben. Als Ausgangspunkt aller weiteren Überlegungen dient uns die folgende Integro-Differentialgleichung:

$$\oint \mathcal{D}\psi^* \mathcal{D}\psi \frac{\delta}{\delta \psi_1^*} \left\{ \psi_2^* e^{-\mathcal{A}[\psi^*, \psi]/\hbar} \right\} = 0, \quad (4.34)$$

die wir aus dem schnellen Verschwinden der Exponentialfunktion im Unendlichen folgern können. Nach der expliziten Ausführung der darin vorkommenden Funktionalableitung erhalten wir mit der Wirkung (4.33) die so genannte Schwinger-Dyson-Gleichung

$$\oint \mathcal{D}\psi^* \mathcal{D}\psi \left\{ \delta_{12} - \int_3 G_{13}^{(0)-1} \psi_3 \psi_2^* - \frac{1}{\hbar} \int_{345} V_{13,45}^{(\text{int})} \psi_5 \psi_4^* \psi_3 \psi_2^* \right\} e^{-\mathcal{A}[\psi^*, \psi]/\hbar} = 0 \quad . \quad (4.35)$$

Der erste Summand stellt dabei die Zustandssumme (4.2) multipliziert mit der Delta-Funktion dar, also $Z_{GK} \delta_{12}$. Der zweite Summand steht für die Verbindung des freien Integralkerns mit dem vollen Propagator (4.9) entsprechend der Gleichung $Z_{GK} \int_3 G_{13}^{(0)-1} \mathbf{G}_{32}$. Es bleibt also nur zu klären, was der letzte Summand in (4.35) bedeutet.

Zur Klärung dieser Frage berechnen wir zuerst die Funktionalableitung der Zustandssumme (4.2) nach dem freien Integralkern und erhalten

$$\frac{\delta Z_{GK}}{\delta G_{21}^{(0)-1}} = - \oint \mathcal{D}\psi^* \mathcal{D}\psi \psi_1 \psi_2^* e^{-\mathcal{A}[\psi^*, \psi]/\hbar} = -Z_{GK} \mathbf{G}_{12} \quad , \quad (4.36)$$

wobei wir uns bei der letzten Gleichung noch an die Definition des vollen Propagators in (4.9) erinnern. Weiterhin wenden wir die Funktionalableitung nach dem freien Integralkern auf diesen Propagator und erhalten

$$\frac{\delta \mathbf{G}_{34}}{\delta G_{21}^{(0)-1}} = \mathbf{G}_{12} \mathbf{G}_{34} - \frac{1}{Z_{GK}} \oint \mathcal{D}\psi^* \mathcal{D}\psi \psi_1 \psi_2^* \psi_3 \psi_4^* e^{-\mathcal{A}[\psi^*, \psi]/\hbar} \quad . \quad (4.37)$$

Der letzte Term hier hat schon die Form, die im letzten Summanden von der Schwinger-Dyson-Gleichung (4.35) erforderlich ist. Doch dazu formen wir die Funktionalableitung auf der linken

Seite in (4.37) noch etwas um. Durch die zweite Beziehung (4.28) lässt sich der volle Propagator identisch erweitern mit dem Ergebnis

$$\frac{\delta \mathbf{G}_{34}}{\delta G_{21}^{(0)-1}} = - \int_{56} \mathbf{G}_{35} \frac{\delta \mathbf{G}_{56}^{-1}}{\delta G_{21}^{(0)-1}} \mathbf{G}_{64} = - \mathbf{G}_{32} \mathbf{G}_{14} + \int_{56} \mathbf{G}_{35} \frac{\delta \Sigma_{56}}{\delta G_{21}^{(0)-1}} \mathbf{G}_{64} . \quad (4.38)$$

Im letzten Schritt haben wir noch die Definition der Selbstenergie (4.16) verwendet. Zusammen mit (4.37) ergibt sich damit für den Mittelwert des Viererprodukts der Felder

$$\frac{1}{Z_{GK}} \oint \mathcal{D}\psi^* \mathcal{D}\psi \psi_1 \psi_2^* \psi_3 \psi_4^* e^{-\mathcal{A}[\psi^*, \psi]/\hbar} = \mathbf{G}_{12} \mathbf{G}_{34} + \mathbf{G}_{32} \mathbf{G}_{14} - \int_{56} \mathbf{G}_{35} \frac{\delta \Sigma_{56}}{\delta G_{21}^{(0)-1}} \mathbf{G}_{64} . \quad (4.39)$$

Übrigens entspricht diese Beziehung der verallgemeinerten Wick-Regel der Viererfeld-Mittelwerte [98]. Diese wurde für wechselwirkungsfreie Mittelwerte aufgestellt und ergab lediglich die Summe der beiden verschiedenen Produkte von freien Propagatoren. Für den Mittelwert der wechselwirkenden Theorie musste diese Regel offensichtlich um den Ableitungsterm der Selbstenergie erweitert werden.

Nach diesen Vorbemerkungen sind wir nun in der Lage, die Schwinger-Dyson-Gleichung (4.35) auf die Form

$$\begin{aligned} \delta_{12} - \int_3 G_{13}^{(0)-1} \mathbf{G}_{32} - \frac{1}{\hbar} \int_{345} V_{13,45}^{(\text{int})} \mathbf{G}_{32} \mathbf{G}_{54} - \frac{1}{\hbar} \int_{345} V_{13,45}^{(\text{int})} \mathbf{G}_{34} \mathbf{G}_{52} \\ + \frac{1}{\hbar} \int_{34567} V_{13,45}^{(\text{int})} \mathbf{G}_{36} \frac{\delta \Sigma_{67}}{\delta G_{45}^{(0)-1}} \mathbf{G}_{72} = 0 \end{aligned} \quad (4.40)$$

zu bringen. Erinnern wir uns noch an die Definition der Selbstenergie (4.16) und die Darstellung der Delta-Funktion in (4.28), so erhalten wir nach Erweiterung mit $\int_2 \mathbf{G}_{28}^{-1}$

$$\Sigma_{12} = - \frac{1}{\hbar} \int_{34} V_{12,34}^{(\text{int})} \mathbf{G}_{43} - \frac{1}{\hbar} \int_{34} V_{14,32}^{(\text{int})} \mathbf{G}_{43} - \frac{1}{\hbar} \int_{345678} V_{16,78}^{(\text{int})} \mathbf{G}_{65} \mathbf{G}_{37} \mathbf{G}_{84} \frac{\delta \Sigma_{52}}{\delta G_{34}} . \quad (4.41)$$

Für den letzten Summanden verwendeten wir noch die Umformung (4.29). Die Gleichung (4.41) repräsentiert nun die Bestimmungsgleichung für die Selbstenergie und kann auch graphisch mit Hilfe der Elemente (4.21)–(4.23) und der Anklebevorschrift (4.24) als

$$1 \rightarrow \text{---} \circ \text{---} 2 = \text{---} \circ \text{---} 2 + \text{---} \text{---} \text{---} 2 + \text{---} \text{---} \text{---} 2 + \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \frac{\delta \Sigma_{52}}{\delta G_{34}} \text{---} \text{---} 2 \quad (4.42)$$

dargestellt werden.

Zur Auswertung der Gleichung (4.41) bzw. (4.42) fehlt uns noch die explizite Kenntnis des darin vorkommenden vollen Propagators \mathbf{G} . Dieser kann aber wiederum aus der Selbstenergie nach der Dyson-Gleichung (4.17) bestimmt werden. Letztere lässt sich in der abgekürzten Schreibweise als

$$\mathbf{G}_{12} = G_{12}^{(0)} + \int_{34} \mathbf{G}_{13} \Sigma_{34} G_{42}^{(0)} \quad (4.43)$$

hinschreiben. Mit den graphischen Elementen (4.21)–(4.23) und Anklebevorschriften (4.25) lautet die dazugehörige diagrammatische Darstellung

$$1 \rightleftarrows 2 = 1 \leftarrow 2 + 1 \rightleftarrows \bigcirc \leftarrow 2 \quad . \quad (4.44)$$

Diese Identität stellt nun zusammen mit der Bestimmungsgleichung für die Selbstenergie (4.42) ein selbstkonsistentes Gleichungs-System zur Erzeugung von Feynman-Diagrammen der Selbstenergie und des wechselwirkenden Propagators dar.

Dieses Gleichungs-System werten wir nun rekursiv Ordnung für Ordnung aus. Dazu bemerken wir zuerst, dass die Diagramme der Selbstenergie nach (4.42) mindestens eine Wechselwirkungslinie besitzen. Daher hat der volle Propagator nach (4.44) einen einzigen wechselwirkungsfreien Beitrag, nämlich den freien Propagator. Das schreiben wir in der Form

$$1 \rightleftarrows 2 = 1 \leftarrow 2 + \dots \quad , \quad (4.45)$$

was der Gleichung (4.12) entspricht. Hier nutzen wir diesen Umstand weiterhin aus, um die Diagramme der Selbstenergie in der niedrigsten störungstheoretischen Ordnung zu erzeugen. Dazu bemerken wir noch, dass der letzte Term in (4.41) mindestens ab der zweiten Ordnung beiträgt und für das Resultat

$$1 \rightleftarrows \bigcirc \leftarrow 2 = 1 \leftarrow \bigcirc \leftarrow 2 + 1 \leftarrow \text{wavy} \leftarrow 2 + \dots \quad (4.46)$$

noch keine Rolle spielt. Die beiden Beiträge der niedrigsten Ordnung in (4.46) werden als das direkte und das Austausch-Diagramm bezeichnet. Nach Einsetzen dieses Resultats in (4.44) erhalten wir zusammen mit (4.45) für den Propagator

$$1 \rightleftarrows 2 = 1 \leftarrow 2 + 1 \leftarrow \bigcirc \leftarrow 2 + 1 \leftarrow \text{wavy} \leftarrow 2 + \dots \quad . \quad (4.47)$$

Zur weiteren Auswertung der Selbstenergie nach (4.42) bemerken wir noch, dass die Ableitung nach einer einfachen Linie im letzten Term entsprechend der Amputationsregel (4.26) erfolgt mit dem Resultat

$$\frac{\delta 5 \leftarrow \bigcirc \leftarrow 2}{\delta 3 \leftarrow 4} = \begin{array}{c} 5 \\ \diagdown \\ \diagup \\ 3 \end{array} \begin{array}{c} 2 \\ \diagup \\ \diagdown \\ 4 \end{array} + \begin{array}{c} 5 \\ \diagup \\ \diagdown \\ 3 \end{array} \begin{array}{c} 2 \\ \diagdown \\ \diagup \\ 4 \end{array} + \dots \quad . \quad (4.48)$$

An dieser Stelle ist noch zu bemerken, dass die beiden äußeren Enden der Selbstenergie-Diagramme durch die Linienamputation unberührt bleiben, weil es keine Linien, sondern nur Stummel sind. Die weitere Berechnung nach (4.42) ist unmittelbar ersichtlich und ergibt die Selbstenergie bis einschließlich der zweiter Ordnung zu

$$\begin{aligned} 1 \rightleftarrows \bigcirc \leftarrow 2 = & 1 \leftarrow \bigcirc \leftarrow 2 + 1 \leftarrow \text{wavy} \leftarrow 2 + 1 \leftarrow \bigcirc \leftarrow \bigcirc \leftarrow 2 + 1 \leftarrow \text{wavy} \leftarrow \bigcirc \leftarrow 2 + 1 \leftarrow \bigcirc \leftarrow \text{wavy} \leftarrow 2 \\ & + 1 \leftarrow \text{wavy} \leftarrow \text{wavy} \leftarrow 2 + 1 \leftarrow \text{wavy} \leftarrow \bigcirc \leftarrow \text{wavy} \leftarrow 2 + 1 \leftarrow \bigcirc \leftarrow \text{wavy} \leftarrow \text{wavy} \leftarrow 2 + \dots \quad . \quad (4.49) \end{aligned}$$

Für den vollen Propagator ergibt sich damit aus der Dyson-Gleichung (4.44) bis einschließlich der zweiten störungstheoretischen Ordnung

$$\begin{aligned}
 1 \rightleftarrows 2 &= 1 \leftarrow 2 + \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} + \text{Diagram 3} + \text{Diagram 4} + \text{Diagram 5} \\
 &+ \text{Diagram 6} + \text{Diagram 7} + \text{Diagram 8} + \text{Diagram 9} \\
 &+ \text{Diagram 10} + \text{Diagram 11} + \text{Diagram 12} + \text{Diagram 13} + \dots \quad (4.50)
 \end{aligned}$$

Interessant ist an dieser Stelle noch zu bemerken, dass die Selbstenergie (4.49) offensichtlich genau diejenigen Beiträge des Propagators (4.50) enthält, die Ein-Teilchen-irreduzibel sind. Das sind nämlich in der Tat nur diejenigen Diagramme, die nach einer beliebigen Amputation einer inneren gerichteten Linie immer noch zusammenhängend bleiben, und das sind in (4.50) alle bis auf die vier Diagramme der untersten Zeile. Aus diesem Grund wird die Selbstenergie in der Literatur manchmal auch als die Ein-Teilchen-irreduzible Zwei-Punkt-Funktion bezeichnet (z.B. in Ref. [50,99]). Dennoch kann man nicht sagen, dass die Selbstenergie aus einer Teilmenge der Propagator-Diagramme besteht, weil sich ihre diagrammatische Strukturen in einem Punkt stark unterscheiden. Die äußeren Enden der Selbstenergie-Diagramme werden durch Stummel repräsentiert, während es bei den Diagrammen des vollen Propagators ganze gerichtete Linien sind, die an den Stummel dranhängen. In unseren Diagrammen wurde dieser Umstand graphisch durch die etwas längeren äußeren Enden hervorgehoben.

Nach erfolgreicher Erzeugung der Diagramme der Selbstenergie und des Propagators sind wir nun auch in der Lage, die Graphen des wechselwirkenden Anteils des großkanonischen Potentials, die so genannten Vakuum-Diagramme, zu konstruieren. Wie sich in Kürze herausstellen wird, brauchen dafür die Diagramme aus (4.49) und (4.50) nur in einer geeigneter Weise verbunden zu werden. Diese Vorgehensweise stellt im gewissen Sinne eine Umkehrung der Darstellung in Ref. [100] dar. Darin wurden die Vakuum-Diagramme rekursiv aus einer selbstkonsistenten Gleichung erzeugt (siehe dazu auch Ref. [44]), und die Graphen der Selbstenergie entstanden daraus mit Hilfe der Linienamputation.

Als Ausgangspunkt der weiteren Ausführungen gilt uns hier die Feststellung

$$\frac{\delta \mathcal{F}_{GK}}{\delta G_{12}^{(0)-1}} = \frac{1}{\beta} \mathbf{G}_{21} \quad , \quad (4.51)$$

die nach Definition (4.11) direkt aus (4.36) folgt. Eine entsprechende Beziehung besteht auch zwischen den wechselwirkungsfreien Größen: $\delta \mathcal{F}_{GK}^{(0)}/\delta G_{12}^{(0)-1} = G_{21}^{(0)}/\beta$. Somit erhalten wir für den wechselwirkenden Anteil des großkanonischen Potentials $W^{(\text{int})}$ aus (4.11) die folgende Identität:

$$\frac{\delta W^{(\text{int})}}{\delta G_{12}^{(0)-1}} = -\mathbf{G}_{21} + G_{21}^{(0)} \quad . \quad (4.52)$$

Sie lässt sich noch umformen, indem wir die Ableitungsvorschrift (4.29) für die linke Seite und die Dyson-Gleichung (4.43) für die rechte Seite verwenden. Damit erhalten wir

$$\int_{34} G_{24}^{(0)} \frac{\delta W^{(\text{int})}}{\delta G_{34}^{(0)}} G_{31}^{(0)} = - \int_{34} \mathbf{G}_{24} \Sigma_{43} G_{31}^{(0)} . \quad (4.53)$$

Erweitern wir diese Gleichung noch mit $\int_{12} G_{12}^{(0)-1}$, so ergibt sich nach der ersten Gleichung aus (4.28) das folgende Ergebnis:

$$\hat{L} W^{(\text{int})} = \int_{12} \mathbf{G}_{12} \Sigma_{21} , \quad (4.54)$$

wobei wir uns noch an den Linienzähleroperator (4.30) erinnerten. Diese Gleichung lässt sich mit den Elementen (4.22) und (4.23) weiterhin graphisch als

$$\hat{L} W^{(\text{int})} = \text{Diagramm} \quad (4.55)$$

darstellen.

Mit der Gleichung (4.55) steht uns nun die Bestimmungsgleichung für den wechselwirkenden Anteil des großkanonische Potentials zur Verfügung, mit deren Hilfe wir die dazugehörigen Vakuum-Diagramme erhalten. Dazu verwenden wir die Ergebnisse für die Selbstenergie und die Paar-Korrelationsfunktion (4.49), (4.50) und beachten die Vorschriften (4.24) und (4.32). So ergibt sich bis zur zweiten Ordnung in der Wechselwirkung

$$\begin{aligned} W^{(\text{int})} = & \frac{1}{2} \text{Diagramm 1} + \frac{1}{2} \text{Diagramm 2} + \frac{1}{2} \text{Diagramm 3} + \text{Diagramm 4} \\ & + \frac{1}{2} \text{Diagramm 5} + \frac{1}{4} \text{Diagramm 6} + \frac{1}{4} \text{Diagramm 7} + \dots . \end{aligned} \quad (4.56)$$

Wie man aus den Resultaten (4.49), (4.50) erkennt, haben alle Diagramme der Selbstenergie und der Greens-Funktion Multiplizität eins. Bei den Vakuum-Diagrammen aus (4.56) ist dies allerdings nicht mehr der Fall. Die Multiplizitäten hier lassen sich jedoch mit Symmetrie-Eigenschaften der Diagramme erklären, wie in Ref. [44] erläutert wird.

Interessanterweise besitzen die hier präsentierten Diagramme eine verblüffende Ähnlichkeit mit denjenigen aus der Quantenelektrodynamik (QED) [100]. Jedoch wechseln die Vorzeichen der Diagramme dort je nach Anzahl der geschlossenen Teilchenschleifen, was auf das fermionische Charakter der beteiligten Elektronen zurückzuführen ist (siehe entsprechende Diagramme für die fermionische Vielteilchentheorie in [44]). Das ist auch kein Zufall, denn die zugrunde liegenden Theorien haben formal auch große Ähnlichkeiten. Lediglich die Interpretation einzelner Terme ist etwas verschieden. So werden in der QED alle Wechselwirkungen durch Photonen vermittelt, die man z.B. durch gewellte Linien darstellt. Auch in der hier diskutierten Vielteilchentheorie stehen die gewellten Linien für die Wechselwirkungen. Der prinzipielle Unterschied besteht nun darin, dass die Wechselwirkungen hier instantan per Fernwirkung ablaufen, was den nichtrelativistischen Charakter der Vielteilchen-Theorie verdeutlicht.

4.1.5 Molekularfeld-Näherung

In diesem Abschnitt diskutieren wir die Folgen der Selbstenergie-Renormierung, die wir bereits im Unterabschnitt 4.1.2 angekündigt haben. Dabei verwenden wir zuerst die Hartree-Fock-Näherung für die Selbstenergie und berücksichtigen den Einfluss der Wechselwirkung im Mittel. Diese Vorgehensweise entspricht der Hartree-Fock-Molekularfeld-Näherung, deren übliche Darstellung mit Hilfe von Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren z. B. in Ref. [65,101] zu finden ist. Die volle Wirkung im wechselwirkenden Problem (4.33) reduziert sich dadurch auf die so genannte effektive Wirkung, die nur quadratische Feldvariablen enthält. Die gesamte Theorie wird in dieser Näherung effektiv Gauss-artig.

Wir beginnen hier mit der Hartree-Fock-Näherung für die Selbstenergie. Sie basiert auf der selbstkonsistenten Gleichung (4.41) bzw. (4.42), die wir bei den ersten zwei Termen abbrechen, d.h. wir vernachlässigen den letzten Ableitungsterm, der von der höheren Wechselwirkungsordnung ist, und betrachten die Größe

$$\Sigma_{12}^{\text{HF}} \equiv \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} = -\frac{1}{\hbar} \int_{34} V_{12,34}^{(\text{int})} \mathbf{G}_{43} - \frac{1}{\hbar} \int_{34} V_{14,32}^{(\text{int})} \mathbf{G}_{43} . \quad (4.57)$$

Der erste direkte Term ist dabei der Hartree-Beitrag zur Selbstenergie und der zweite Austausch-Term ist der entsprechende Fock-Beitrag. Der Fehler, den wir durch die Beschränkung auf diese beide Terme in Kauf nehmen, ist mindestens von der zweiten Ordnung der Störungstheorie, wie man aus

$$\Sigma_{12} - \Sigma_{12}^{\text{HF}} = \text{Diagram 3} + \text{Diagram 4} + \dots . \quad (4.58)$$

sieht. Die Diagramme der vollen Selbstenergie entnehmen wir dabei aus (4.49) und gewinnen diejenigen der Hartree-Fock-Näherung (4.57) durch Einsetzen der beiden niedrigsten Ordnungen von (4.50) anstelle des vollen Propagators. Vergleicht man (4.58) mit (4.49), so erkennt man weiterhin, dass bis zu dieser Ordnung nur die letzten beiden Diagramme der vollen Selbstenergie im Hartree-Fock genäherten Ausdruck fehlen. Dabei ist eine ganze Klasse von Diagrammen darin bereits absorbiert, wie am Beispiel der ersten sechs Diagramme aus (4.49) zu sehen ist.

Ähnlich wird auch das großkanonische Potential in dieser Näherung motiviert. Dazu setzt man die Selbstenergie (4.57) in (4.55) ein, verwendet den Operator \hat{L} aus (4.30) näherungsweise als den Zähleroperator der vollen Linien und vernachlässigt alle höheren Korrekturterme. Diese genäherte Größe ist

$$W^{\text{HF}} \equiv \frac{1}{2} \text{Diagram 5} + \frac{1}{2} \text{Diagram 6} = -\frac{1}{2\hbar} \int_{1234} \mathbf{G}_{21} V_{12,34}^{(\text{int})} \mathbf{G}_{43} - \frac{1}{2\hbar} \int_{1234} \mathbf{G}_{23} V_{12,34}^{(\text{int})} \mathbf{G}_{41} . \quad (4.59)$$

Auch hier heißt der erste Term das direkte oder Hartree-Vakuum-Diagramm und der zweite das Austausch- oder Fock-Vakuum-Diagramm. Der Fehler dieser Näherung ist ebenfalls von mindestens zweiter störungstheoretischer Ordnung. Allerdings repräsentieren die beiden Terme nicht die niedrigste Ordnung des großkanonischen Potentials, sondern erst die führenden Korrekturen zum $\mathcal{F}_{GK}^{(0)}$ -Term. Daher kann man hier auch nicht von einer Absorption bestimmter Diagrammen-Klassen in Hartree- und Fock-Termen sprechen, wie es bei den Selbstenergie-Diagrammen noch der Fall war.

Nun wollen wir sehen, welche Konsequenzen die Hartree-Fock-Näherung auf die Theorie hat. Dazu erweitern wir die Wirkung (4.33) mit der Hartree-Fock-Selbstenergie (4.57) additiv und erhalten

$$\begin{aligned} \mathcal{A}[\psi^*, \psi]/\hbar &= \int_{12} \left[G_{12}^{(0)-1} - \Sigma_{12}^{\text{HF}} \right] \psi_1^* \psi_2 + \frac{1}{2\hbar} \int_{1234} V_{12,34}^{(\text{int})} \psi_1^* \psi_2 \psi_3^* \psi_4 \\ &\quad - \frac{1}{\hbar} \int_{1234} V_{12,34}^{(\text{int})} \mathbf{G}_{43} \psi_1^* \psi_2 - \frac{1}{\hbar} \int_{1234} V_{14,32}^{(\text{int})} \mathbf{G}_{43} \psi_1^* \psi_2 . \end{aligned} \quad (4.60)$$

Die zu $V_{12,34}^{(\text{int})}$ gehörenden Paar- und Vierer-Felder ersetzen wir nun durch ihre Mittelwerte. Für die ersten der beiden ergeben sich dabei nach (4.36) die vollen Propagatoren $\langle \psi_1^* \psi_2 \rangle = \mathbf{G}_{21}$. Für die Vierer-Feld-Mittelwerte erinnern wir uns noch an die Beziehung (4.39) und stellen näherungsweise die Beziehung $\langle \psi_1^* \psi_2 \psi_3^* \psi_4 \rangle \approx \mathbf{G}_{21} \mathbf{G}_{43} + \mathbf{G}_{23} \mathbf{G}_{41}$ fest, für die wir den letzten Ableitungsterm höherer Wechselwirkungsordnung in (4.39) vernachlässigten. In dieser Mittelwert-Näherung, auch Molekularfeld-Näherung genannt, ergibt sich nun die Wirkung (4.60) zu

$$\mathcal{A}[\psi^*, \psi]/\hbar \approx \int_{12} \left[G_{12}^{(0)-1} - \Sigma_{12}^{\text{HF}} \right] \psi_1^* \psi_2 - \frac{1}{2\hbar} \int_{1234} V_{12,34}^{(\text{int})} \mathbf{G}_{43} \mathbf{G}_{21} - \frac{1}{2\hbar} \int_{1234} V_{12,34}^{(\text{int})} \mathbf{G}_{41} \mathbf{G}_{23} . \quad (4.61)$$

Die beiden letzten Terme stellen gerade das großkanonische Potential in der Hartree-Fock-Näherung (4.59) dar. Der Ausdruck in den eckigen Klammern repräsentiert dabei entsprechend der Beziehung (4.16) den vollen Integralkern der Hartree-Fock-genäherten Theorie

$$\mathbf{G}_{12}^{\text{HF}-1} \equiv G_{12}^{(0)-1} - \Sigma_{12}^{\text{HF}} . \quad (4.62)$$

Damit lässt sich (4.61) auch als

$$\mathcal{A}[\psi, \psi]/\hbar \approx \mathcal{A}^{\text{HF}}[\psi, \psi]/\hbar + W^{\text{HF}} \quad (4.63)$$

mit der Hartree-Fock-Wirkung

$$\mathcal{A}^{\text{HF}}[\psi, \psi]/\hbar \equiv \int_{12} \mathbf{G}_{12}^{\text{HF}-1} \psi_1^* \psi_2 \quad (4.64)$$

schreiben. Diese effektive Wirkung der Hartree-Fock-Molekularfeld-Näherung besitzt nun die angenehme Eigenschaft, quadratisch in den Feldvariablen zu sein, und führt somit zu einer effektiv wechselwirkungsfreien Gaussischen Theorie. Lediglich das Energiespektrum oder solche Parameter der Theorie wie das chemische Potential ändern sich dabei unter dem Einfluss der Selbstenergie.

Die Näherung (4.63) kann alternativ auch mit Hilfe der so genannten Hubbard-Stratonovich-Transformation [102,103] in der niedrigsten Sattelpunkts-Näherung erhalten werden, wie es z.B. in Ref. [104] oder im Textbuch [48] geschildert wurde. In der letzteren Darstellung wurde allerdings noch darauf hingewiesen, dass die Hartree- und Fock-Anteile im Prinzip in beliebigen Proportionen auftreten dürfen. Ferner gibt es noch einen dritten Kandidaten, das Viererfeld in Feldpaar-Mittelwerte zu zerlegen. Dabei treten Paar-Erzeugungen bzw. -Vernichtungen in den so genannten anomalen oder Quasi-Mittelwerten $\langle \psi_i^* \psi_j^* \rangle$ bzw. $\langle \psi_i \psi_j \rangle$ auf. Sie sind Konsequenzen der Bogoliubovschen Feldzerlegungen $\psi = \langle \psi \rangle + \delta\psi$ in den dominierenden Hintergrundanteil $\langle \psi \rangle$ und

den kleinen Fluktuationsanteil $\delta\psi$ [70]. Die auf dieser Zerlegung basierende Molekularfeld-Näherung liefert für schwache Wechselwirkungen insbesondere bei einer verschwindenden Temperatur akkurate Mittelwerte thermodynamischer Größen. Für höhere Temperaturen kann der Fluktuationsanteil nicht mehr als klein behandelt werden und so muss die Bogoliubov-Näherung erweitert werden. So ergibt sie beispielsweise in Verbindung mit der Hartree-Fock-Näherung die so genannte Hartree-Fock-Bogoliubov-Approximation, die aber bekanntermaßen im thermodynamischen Limes kein lückenloses Spektrum besitzt [105]. Damit kollidiert sie mit der allgemeingültigen Forderung des Hugenholz-Pines Theorems [106]. Speziell bei nicht zu niedrigen Temperaturen um den kritischen Punkt sind jedoch die Hintergrund-Anteile $\langle\psi\rangle$ bzw. $\langle\psi^*\rangle$ und somit auch die zusätzlichen Bogoliubov-Terme zu vernachlässigen.

Wie gehen wir in unseren späteren Berechnungen konkret vor und welche Rolle spielt dabei die Selbstenergie-Resummation? Die exakte großkanonische Zustandssumme Z_{GK} oder das Potential \mathcal{F}_{GK} , von denen wir in der obigen Diskussion ausgegangen sind, liegen uns dabei natürlich nicht vor. Stattdessen müssen wir auf ihre störungstheoretischen Ausdrücke zurückgreifen. In der führenden störungstheoretischen Ordnung erhalten wir aus (4.11) mit dem direkten und dem Austausch-Term des großkanonischen Potentials aus (4.56) den folgenden Ausdruck:

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_{GK} &= \mathcal{F}_{GK}^{(0)} + \mathcal{F}_{GK}^{(D)} + \mathcal{F}_{GK}^{(A)} + \dots \\ &= -\frac{1}{\beta} \ln Z_{GK}^{(0)} + \frac{1}{2\hbar\beta} \int_{1234} V_{12,34}^{(\text{int})} G_{43}^{(0)} G_{21}^{(0)} + \frac{1}{2\hbar\beta} \int_{1234} V_{12,34}^{(\text{int})} G_{41}^{(0)} G_{23}^{(0)} + \dots \quad (4.65)\end{aligned}$$

Um zu sehen, wie der erste Logarithmus-Term durch die Selbstenergie-Resummation beeinflusst wird, formen wir die freie Zustandssumme identisch um und erhalten mit dem Hartree-Fock-Integralkern (4.62) und der effektiv freien Wirkung (4.64)

$$Z_{GK}^{(0)} = \oint \mathcal{D}\psi^* \mathcal{D}\psi e^{-\mathcal{A}^{\text{HF}}[\psi^*,\psi]/\hbar} \exp\left\{-\int_{12} \Sigma_{12}^{\text{HF}} \psi_1^* \psi_2\right\}. \quad (4.66)$$

Nach Taylor-Entwicklung der Exponential-Funktion ergibt sich daraus mit der expliziten Form der Selbstenergie (4.57)

$$Z_{GK}^{(0)} \approx \oint \mathcal{D}\psi^* \mathcal{D}\psi e^{-\mathcal{A}^{\text{HF}}[\psi^*,\psi]/\hbar} \left\{1 + \frac{1}{\hbar} \int_{1234} V_{12,34}^{(\text{int})} \mathbf{G}_{43} \psi_1^* \psi_2 + \frac{1}{\hbar} \int_{1234} V_{14,32}^{(\text{int})} \mathbf{G}_{43} \psi_1^* \psi_2\right\}, \quad (4.67)$$

was wir auch als

$$Z_{GK}^{(0)} \approx Z_{GK}^{(0)\text{HF}} \left\{1 + \frac{1}{\hbar} \int_{1234} V_{12,34}^{(\text{int})} \mathbf{G}_{43} \mathbf{G}_{21}^{\text{HF}} + \frac{1}{\hbar} \int_{1234} V_{14,32}^{(\text{int})} \mathbf{G}_{43} \mathbf{G}_{21}^{\text{HF}}\right\} \quad (4.68)$$

schreiben können. Mit $Z_{GK}^{\text{HF}(0)}$ meinen wir dabei das mit Hilfe der Hartree-Fock-Wirkung gewichtete Funktionalintegral, welches im ersten Summanden in (4.67) vorkommt. Der Ausdruck $\mathbf{G}_{21}^{\text{HF}}$ stellt den dazu entsprechenden Feldpaar-Mittelwert dar, den effektiv freien Propagator in Hartree-Fock-Näherung. Setzt man nun das Resultat (4.68) in (4.65) ein, so erhält man das bis zur ersten Ordnung gültige großkanonische Potential

$$\mathcal{F}_{GK} = -\frac{1}{\beta} \ln Z_{GK}^{\text{HF}(0)} - \frac{1}{2\hbar\beta} \int_{1234} V_{12,34}^{(\text{int})} \mathbf{G}_{43} \mathbf{G}_{21} - \frac{1}{2\hbar\beta} \int_{1234} V_{12,34}^{(\text{int})} \mathbf{G}_{41} \mathbf{G}_{23} + \dots \quad (4.69)$$

Dabei ersetzen wir noch alle freien und effektiv freien Hartree-Fock-Propagatoren durch die vollen Propagatoren nach den Näherungsvorschriften $G_{21}^{(0)} = \mathbf{G}_{21} + \dots$ bzw. $\mathbf{G}_{21}^{\text{HF}} = \mathbf{G}_{21} + \dots$, was bis zur ersten Ordnung der Störungstheorie legitim war. Das Ergebnis (4.69) entspricht nun genau demjenigen, welches wir aus der Hartree-Fock-Molekularfeld-Näherung mit der Wirkung (4.63) erhalten würden. Interessant zu bemerken ist dabei noch, dass die beiden $V^{(\text{int})}$ -Terme in (4.69) denjenigen aus dem ursprünglichen Potential (4.65) entsprechen, aber mit dem umgekehrten Vorzeichen vorkommen. Die Ersetzung der freien Parameter der Theorie durch die renormierten Größen liefert aber diesen Vorzeichenwechsel automatisch mit.

4.2 Modell der Wechselwirkung

Das Hauptaugenmerk der Untersuchungen dieses Kapitels gilt dem Einfluss einer schwachen Wechselwirkungen auf das Bose-Gas. Doch welche Wechselwirkungen meinen wir und wie sehen diese aus? Genau dieser Fragestellung widmen wir uns in der anschließenden Diskussion dieses Abschnitts.

4.2.1 Kontakt-Wechselwirkung

Die wichtigste Wechselwirkung zwischen den einzelnen Atomen bzw. Molekülen in einem stark verdünnten neutralen Bose-Gas ist die so genannte Kontakt-Wechselwirkung. Dabei handelt es sich um eine effektive Beschreibung der mikroskopischen Prozesse, die uns aus der Welt makroskopischer Stoßteilnehmer vertraut ist. Man denke dabei z.B. nur an die aneinander stoßenden Billardkugeln. Doch die Welt der mikroskopischen Gasteilchen wird von den Coulomb-Kräften regiert. Obwohl die einzelnen Atome oder Moleküle insgesamt neutral sind, bestehen sie aus den geladenen Kernen und den Elektronen, welche inhomogen im Raum verteilt sind und sich z.B. in den Van-der-Waals-Kräften zeigen. Das Wechselwirkungspotential ist im allgemeinen kompliziert, z.B. Lennard-Jones-artig, kann jedoch für verdünnte Gase im Tieftemperaturbereich stark vereinfacht werden. So erstreckt sich ein Atom bei Temperaturen unterhalb des kritischen Wertes effektiv über die thermische de Broglie-Wellenlänge

$$\lambda \equiv \left(\frac{2\pi\hbar^2\beta}{M} \right)^{1/2} \quad (4.70)$$

aus (2.93) von typischerweise $\lambda > 1000 \sim 10000 a_B$, wobei a_B den Bohrschen Radius darstellt. Die effektive Reichweite der Wechselwirkung liegt demgegenüber in den meisten Experimenten in etwa bei $a_{ww} \sim 100 a_B$. Bei diesen Größenordnungen werden die Details des Wechselwirkungspotentials ausgeschmiert, so dass die Wechselwirkung mit einer ausreichenden Genauigkeit allein durch ihre Reichweite zu charakterisieren ist [107,108]. Weiterhin ersetzen wir daher die kurzreichweitige Wechselwirkung zwischen zwei Atomen durch die effektive Kontakt-Wechselwirkung zweier Kugeln des Radius a_s .

Das Problem der Streuung harter Kugeln ist aus rechnerischer Sicht nicht unproblematisch, weil dadurch das Volumen, das einem Teilchen zur Verfügung steht, explizit einzuschränken ist.

Doch für dieses Problem kann mit Hilfe der Pseudopotential-Methode von Fermi Abhilfe geschaffen werden [85,109,110]. Damit kann ein Hartkugel-Potential näherungsweise durch eine Reihe lokaler Pseudopotentiale ersetzt werden. Die Idee dahinter führen wir des Weiteren explizit vor und formulieren dafür zuerst das Streuproblem zweier identischer Atome im Schwerpunkts-Koordinatensystem:

$$\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M^*} \psi(\mathbf{x}) = \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2M^*} \Delta_{\mathbf{x}} \psi(\mathbf{x}) , & |\mathbf{x}| > a_s \\ \infty & , |\mathbf{x}| \leq a_s . \end{cases} \quad (4.71)$$

Der Ausdruck M^* steht hier für die reduzierte Masse $M^* \equiv M \times M / (M + M) = M/2$ der Relativbewegung der Teilchen, \mathbf{k} für den Relativ-Impuls und \mathbf{x} für die Relativ-Koordinate. Die Eigenfunktion ψ repräsentiert dabei die Zwei-Teilchen-Wellenfunktion nach Abseparation des Schwerpunkts-Anteils. Damit erhalten wir sofort

$$\psi(\mathbf{x}) = 0 \quad \text{für} \quad |\mathbf{x}| \leq a_s . \quad (4.72)$$

Im Gebiet $|\mathbf{x}| > a_s$ schreiben wir das Problem in Kugelkoordinaten $\mathbf{x} = \mathbf{x}(r, \theta, \phi)$ mit Hilfe des Drehimpuls-Operators $\hat{\mathbf{L}}$ als

$$\left[\mathbf{k}^2 + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hat{\mathbf{L}}^2(\theta, \phi)}{\hbar^2 r^2} \right] \psi(r, \theta, \phi) = 0 . \quad (4.73)$$

Weiterhin separieren wir die Radial- und Winkel-Komponenten nach $\psi(r, \theta, \phi) = R_{lm}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$ ab. Die Kugelflächenfunktionen Y_{lm} genügen dabei der Eigenwertgleichung $\hat{\mathbf{L}}^2(\theta, \phi) Y_{lm}(\theta, \phi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \phi)$, wobei l für die Drehimpuls-Quantenzahl steht. Die Gleichung (4.73) reduziert sich dabei zu

$$\left[k^2 + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_{lm}(r) = 0 . \quad (4.74)$$

Für die so genannte s -Wellen-Streuung mit $l = 0$ (und $m = 0$) lässt sich das Problem durch die Wellenfunktion

$$\psi_s(\mathbf{x}) = \frac{c}{r} \sin k(a_s - r) \quad (4.75)$$

mit einer noch unbestimmten Konstante c lösen. Hierfür haben wir noch die Identität $Y_{00}(\theta, \phi) = 1/\sqrt{4\pi} = \text{const}$ ausgenutzt und berücksichtigt, dass aufgrund der Stetigkeit der Wellenfunktion die Anschluss-Bedingung $\psi_s(r = a_s) = 0$ an die Lösung (4.72) gilt.

Nun kommen wir zur Pseudopotential-Beschreibung, indem wir die Wellenfunktion (4.75) auf das gesamte Raumvolumen fortsetzen. Dafür definieren wir eine neue Wellenfunktion

$$\tilde{\psi}_s(\mathbf{x}) = \frac{c}{r} \sin k(a_s - r) \quad \text{für alle} \quad \mathbf{x} \quad (4.76)$$

und suchen nach der Schrödinger Gleichung, der sie genügt. Nun stellen wir als erstes durch direkte Ableitung fest, dass die Beziehung

$$(\Delta_{\mathbf{x}} + k^2) \tilde{\psi}_s(\mathbf{x}) = 0 \quad \text{für alle} \quad \mathbf{x} \neq \mathbf{0} \quad (4.77)$$

gilt. Um zu erfahren, ob diese Gleichung auf den Ursprung $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ auszuweiten ist oder ob an diesem Punkt eine Singularität vorliegt, integrieren wir die linke Seite der obigen Gleichung über den gesamten Raum. Mit Hilfe des Gaussischen Integralsatzes erhalten wir schließlich

$$\int d^3x (\Delta_{\mathbf{x}} + k^2) \tilde{\psi}_s(\mathbf{x}) = -4\pi c \sin ka_s \quad (4.78)$$

und erkennen, dass es am Ursprung eine δ -förmige Singularität geben muss. Statt (4.77) lässt sich für die fortgesetzte Wellenfunktion (4.76) die zu (4.71) entsprechende Form

$$\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M^*} \tilde{\psi}_s(\mathbf{x}) = -\frac{\hbar^2}{2M^*} \Delta_{\mathbf{x}} \tilde{\psi}_s(\mathbf{x}) - \frac{4\pi \hbar^2 \sin ka_s}{2M^*} c \delta(\mathbf{x}) \quad (4.79)$$

feststellen. Die darin vorkommende Konstante c muss allerdings noch bestimmt werden. Dazu bemerken wir die aus (4.76) unmittelbar herleitbare Identität

$$\left. \frac{\partial}{\partial r} [r \tilde{\psi}_s(\mathbf{x})] \right|_{r=0} = -ck \cos ka_s \quad (4.80)$$

und bestimmen daraus die gesuchte Konstante. Die Gleichung (4.79) lässt sich somit weiterhin effektiv in Form einer Schrödinger-Gleichung

$$\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M^*} \tilde{\psi}_s(\mathbf{x}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2M^*} \Delta_{\mathbf{x}} + V^{(\text{int})}(\mathbf{x}) \right] \tilde{\psi}_s(\mathbf{x}) \quad (4.81)$$

mit dem so genannten Pseudopotential

$$V^{(\text{int})}(\mathbf{x}) = \frac{4\pi \hbar^2}{2M^*} \frac{\tan ka_s}{k} \delta(\mathbf{x}) \left. \frac{\partial}{\partial r} (r \bullet) \right|_{r=0} \quad (4.82)$$

schreiben.

Dieses Pseudopotential kann noch etwas vereinfacht werden. So ergibt sich mit der reduzierten Masse $M^* = M/2$ für die niedrigenergetische Streuung mit $ka_s \ll 1$ die impulsunabhängige Näherung

$$V^{(\text{int})}(\mathbf{x}) = \frac{4\pi \hbar^2 a_s}{M} \delta(\mathbf{x}) \left. \frac{\partial}{\partial r} (r \bullet) \right|_{r=0} . \quad (4.83)$$

Sie ist besonders dann gut erfüllt, wenn man sich für die Untersuchungen im Temperaturbereich unterhalb des kritischen Wertes interessiert. Denn mit Hilfe der thermischen de Broglie-Wellenlänge (4.70) lässt sich die Abschätzung $ka_s \sim \sqrt{4\pi} a_s / \lambda$ herleiten. Das ist mit den am Anfang dieses Unterabschnitts erwähnten Werten in der Tat eine kleine Zahl im Bereich $ka_s \sim 0.1$ oder kleiner. Auch der Pseudopotential-Operator $\left. \frac{\partial}{\partial r} (r \bullet) \right|_{r=0}$ lässt sich in den meisten interessanten Fällen weglassen. Auf reguläre Wellenfunktionen wirkt er entsprechend $\left. \frac{\partial}{\partial r} [r \tilde{\psi}(\mathbf{x})] \right|_{r=0} = \tilde{\psi}(\mathbf{0})$ [85], wie die Diracsche δ -Funktion in (4.83) auch schon. Damit reduziert sich das Pseudopotential für die s -Wellen-Streuung zu

$$V_{\delta}^{(\text{int})}(\mathbf{x}) = \frac{4\pi \hbar^2 a_s}{M} \delta(\mathbf{x}) . \quad (4.84)$$

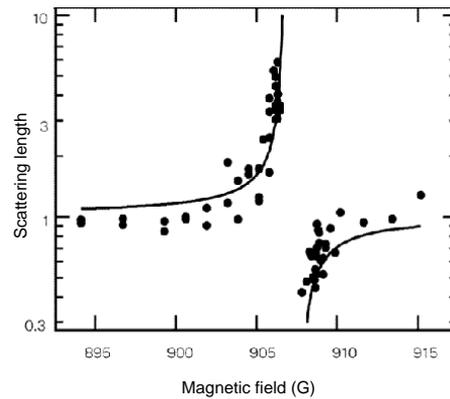


Abbildung 4.1: Streuwellenlängen a_s (in geeigneter Skalierung) im ^{23}Na -Experiment [25] in Abhängigkeit des äußeren magnetischen Feldes. Punkte stellen Messergebnisse und die durchgezogenen Kurven theoretische Erwartungen dar. Bild aus [25].

Interessanterweise spielt also bei einem niederenergetischen Streuprozess zweier Teilchen der effektive Hartkugel-Radius a_s die Rolle der Wechselwirkungs-Stärke. Sie wird in der Literatur auch als die s -Wellen-Streulänge bezeichnet.

In der gerade beschriebenen Situation handelte es sich um die elastische Streuung der beiden Stoßteilnehmer. Doch diese beiden sind keine strukturlose Gebilde wie etwa die modellhaften harten Billardkugeln. Zwischen den streuenden Atomen können nämlich inelastische Prozesse ablaufen, die z.B. zur Bildung eines metastabilen Molekül-ähnlichen Zustandes führen. Solche Prozesse sind von der Streuung zweier Nukleonen bekannt und werden durch so genannte Feshbach-Resonanzen [111,112] erklärt. Sie ergeben sich immer dann, wenn die Streuenergien in der Nähe eines Bindungsniveaus eines kurzlebigen Zwei-Teilchen-Zustandes liegen. Dann wird die Streuung auch besonders effizient und der Streuquerschnitt bzw. die Streulänge a_s steigt über mehrere Größenordnungen an. Die ursprünglich abstoßende Wechselwirkung ($a_s > 0$) kann dabei weiterhin zu einer effektiven Anziehung ($a_s < 0$) wechseln und umgekehrt. Jahrzehnte nach den erfolgreichen Erklärungen nuklearer Prozesse durch die Feshbach-Resonanz wurden analoge Betrachtungen in Ref. [113,114] auf die Vielteilchen-Theorie ausgeweitet. Hier ergab sich sogar eine Möglichkeit, das Energieniveau des Resonanz-Zustandes von aussen zu justieren. Dazu stelle man sich ein tiefgekühltes verdünntes Gas aus spinpolarisierten Atomen vor, für die es in dem entsprechenden Hyperfein-Zustand keine Bindung gibt. Eine solche existiert in einem anderen Hyperfein-Zustand, der durch die Austausch-Wechselwirkung erreicht werden kann. Da es sich um verschiedene Hyperfein-Zustände handelt, können sie mittels des Zeemann-Effekts mit dem äußeren magnetischen Feld gegeneinander energetisch verschoben werden. Bei bestimmten Feldstärken liegen die Niveaus der Bindungszustände bei den niederenergetischen Streuzuständen des spinpolarisierten Hyperfein-Kanals, so dass die Austausch-Wechselwirkung resonant verstärkt wird. Diese Voraussagen wurden 1998 in der Gruppe von Ketterle experimentell bestätigt [25]. Ihre Ergebnisse sind in Abb. 4.1 für positive Werte der Streulängen in ^{23}Na dargestellt. Es zeigt sich also eindeutig, dass die s -Wellen-Streulänge in (4.84) ein effektiver Parameter ist, der experimentell in seiner Größe und sogar Vorzeichen justierbar ist.

Die vorhergehende Diskussion beschränkte sich auf die s -Wellen-Streuung mit der Drehimpulsquantenzahl $l = 0$. Aber wie steht es nun mit den Streuungen in p - ($l = 1$), d - ($l = 2$) und noch höheren Streukanälen? Dazu betrachte man die radiale Schrödinger-Gleichung (4.74) und stelle fest, dass der Drehimpuls-Term darin wie eine Zentrifugalbarriere wirkt, welche die Teilchen daran hindert, den zum Kontakt benötigten Abstandsradius $r = a_s$ zu erreichen. Eine einfache Abschätzung zeigt, dass die zum Überwinden dieser Barriere notwendige Wellenzahl k der Bedingung $ka_s \sim l(l+1)$ genügen muss. Doch wie wir oben bereits bemerkten, ist es für die niederenergetischen Streuungen im Tieftemperaturbereich selbst für $l = 1$ bei Weitem verfehlt. Weiterhin ist für die spinpolarisierten Gase der $l = 1$ -Kanal verboten und $l = 2$ ist die kleinstmögliche nichtverschwindende Drehimpulsquantenzahl. Sie erhöht die Höhe der Zentrifugalbarriere gegenüber dem $l = 1$ -Fall nochmals um einen Faktor 3. Das interessante daran ist jedoch ihre räumliche Anisotropie, die sonst für die dipolare Wechselwirkung charakteristisch ist. Daher wurde sie in der Literatur etwas genauer unter die Lupe genommen (siehe z.B. [115,116]). Natürlich können auch dabei inelastische Streueffekte ähnlich den Feshbach-Resonanzen auftreten, welche die d -Wellen-Streuungen verstärken würden. In der Nähe solcher Resonanzen wurde das Problem in den kürzlich erschienenen Arbeiten [117,118] untersucht. Darin fanden die Autoren zusätzlich zu dem Dipol-artigen Potential einen im Impulsraum nichtlokalen Beitrag, das so genannte Derevianko-Potential. Dieses soll das gewöhnliche dipolare Streu-Potential sogar effektiv um ein Vielfaches übertreffen. Zurzeit gibt es in keinen experimentellen Realisierungen ernsthafte Anzeichen für die d -Wellen-Resonanzen, und solange das so bleibt, ist davon auszugehen, dass Streuungen in den $l = 2$ - und höheren Kanälen im niederenergetischen Bereich stark unterdrückt sind. Deshalb wird uns die s -Wellen-Streuung (4.84) als das Modell der Kontakt-Wechselwirkung schon ausreichen.

4.2.2 Dipolare Wechselwirkung

In einer niederenergetischen Streuung konnte, wie oben bemerkt, die anisotrope dipolare Wechselwirkung noch nicht nachgewiesen werden. Dennoch gibt es noch andere Quellen für derartige Wechselwirkungen. Die wohl naheliegendste Möglichkeit ist bei dipolaren Gasteilchen gegeben, welche im elektromagnetischen Feld dipolare Wechselwirkungen per Fernwirkung erfahren. Man bedenke dabei nur, dass die Alkali-Metalle bereits ein schwaches magnetisches Dipolmoment von $|\mathbf{m}| = 1 m_B$ aufweisen, wobei m_B das Bohrsche Magneton ist. Kürzlich wurde in der Gruppe um Tilman Pfau ein Gas von Chromatomen ^{52}Cr zur Bose-Einstein-Kondensation gebracht [16]. Diese Atome besitzen sechs ungepaarte Valenz-Elektronen und haben daher im Vergleich zu den üblichen Alkali-Metallen das sechsfache magnetische Dipolmoment von $|\mathbf{m}| = 6 m_B$. Eine ganze Klasse von Elementen mit großen Dipolmomenten stellen die seltenen Erden dar, sowie Molybden (Mo) und Mangan (Mn). Ihre Dipolmomente liegen im Bereich von $|\mathbf{m}| = 4 \sim 10 m_B$. Zurzeit können diese Elemente bis zum mK-Bereich vorgekühlt werden [119,120], ihre Kondensations-Temperatur ist aber damit noch nicht erreicht. Andere Systeme mit relativ starken Dipol-Dipol-Wechselwirkungen sind z.B. Rydberg-Atome [121,122]. Aber auch Atome mit induzierten elektrischen Dipolmomenten von etwa 10^{-2} Debye können von Interesse sein [123]. Noch stärkere elektrische Dipolmomente sind in heteronuklearen Molekülen möglich. Ihre Dipolmomente können im Bereich von etwa 1 De-

bye liegen und somit Effekte ergeben, die mehrere Hundert Mal stärker sind als z.B. beim Chrom. Solche Moleküle können in einen ultrakalten (aber noch nicht kondensierten) Zustand durch raffinierte Kühlmethode gebracht [124–126] oder durch die Photoassoziation im metastabilen Zustand erzeugt werden [127–129].

Die spezifische Dipol-Dipol-Wechselwirkung für alle oben beschriebene Systeme lautet

$$V_{DD}^{(\text{int})}(\mathbf{x}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \left\{ \frac{3 [\mathbf{m} \mathbf{x}]^2}{|\mathbf{x}|^5} - \frac{\mathbf{m}^2}{|\mathbf{x}|^3} \right\} + \frac{\mu_0 \mathbf{m}^2}{3} \delta(\mathbf{x}) . \quad (4.85)$$

Im Falle der magnetischen dipolaren Wechselwirkung bedeutet \mathbf{m} das magnetische Dipolmoment und μ_0 die magnetische Permeabilitäts-Konstante. Für elektrische Dipol-Dipol-Wechselwirkungen bedeuten sie entsprechend das elektrische Dipolmoment und die reziproke elektrische Vakuum-Suszeptibilität $1/\varepsilon_0$. Interessanterweise taucht bei dieser Wechselwirkung noch ein δ -Term auf. Abgesehen von der Form, hat er mit der Kontakt-Wechselwirkung nichts (4.84) zu tun, sondern regularisiert lediglich die Divergenz des ersten Potentialterms am Ursprung. Häufig wird er in der Literatur übersehen, ist aber in akkurateren Darstellungen, wie z.B. im Lehrbuch von Jackson zur klassischen Elektrodynamik [130], mitberücksichtigt. Der Ursprung dieses Term liegt in der Impuls-Darstellung der Wechselwirkung (4.85)

$$V_{DD}^{(\text{int})}(\mathbf{q}) = \mu_0 \sum_{i,j=1}^3 m_i m_j \frac{q_i q_j}{q^2} , \quad (4.86)$$

welche man unmittelbar aus der Multipol-Entwicklung des Coulomb-Potentials im Impulsraum gewinnt. Ihre Fourier-Rücktransformierte lautet

$$V_{DD}^{(\text{int})}(\mathbf{x}) = -\frac{\mu_0}{4\pi} \sum_{i,j=1}^3 m_i m_j \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \frac{1}{|\mathbf{x}|} . \quad (4.87)$$

Die zweifache Ortsableitung müssen wir nun mit besonderer Vorsicht ausführen und erhalten mit Hilfe des Gaussischen Integralsatzes die Identität [131]

$$\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \frac{1}{|\mathbf{x}|} = \frac{3x_i x_j - \delta_{ij} \mathbf{x}^2}{|\mathbf{x}|^5} - \frac{4\pi}{3} \delta_{ij} \delta(\mathbf{x}) . \quad (4.88)$$

Die Formel (4.85) entsteht nun durch Einsetzen von (4.88) in (4.87). In Ref. [132] gingen die Autoren den umgekehrten Weg und berechneten ausgehend von dem Dipolpotential (4.85) ohne den regularisierenden δ -Beitrag die entsprechende Fourier-Transformierte. Dabei ergab sich zuerst eine UV-Divergenz, welche mit dem künstlich eingeführten Cutoff beliebiger Größe am Koordinatenursprung beseitigt werden konnte. Diese Regularisierungs-Vorschrift führte nun ebenfalls zu dem richtigen Ergebnis (4.86).

Nach diesen Vorbemerkungen betrachten wir nun das gesamte Wechselwirkungs-Potential als die Summe der beiden Wechselwirkungen (4.84) und (4.85). Wir schreiben sie zusammenfassend als

$$V^{(\text{int})}(\mathbf{x}) = \frac{4\pi \hbar^2 a}{M} \delta(\mathbf{x}) + \frac{\mu_0}{4\pi} \left\{ \frac{3 [\mathbf{m} \mathbf{x}]^2}{|\mathbf{x}|^5} - \frac{\mathbf{m}^2}{|\mathbf{x}|^3} \right\} , \quad (4.89)$$

wobei wir hier noch die effektive δ -Potential-Stärke

$$a \equiv a_s + \frac{\mu_0 m^2 M}{12\pi\hbar^2} \quad (4.90)$$

verwenden. An dieser Stelle müssen wir noch bemerken, dass diese naive Addition der beiden Wechselwirkungen keineswegs als a-priori gegeben zu betrachten ist. Die vorhandenen dipolaren Wechselwirkungen können nämlich Übergänge zwischen den verschiedenen atomaren Hyperfein-Niveaus hervorrufen und somit ähnlich den bereits erwähnten Austausch-Prozessen die s -Wellen-Streuungen resonant beeinflussen. In diesem Fall würde die gesamte Wechselwirkung sehr stark von den Details des dipolaren Anteils abhängen und sich somit nicht als die Summe unabhängiger Terme verstehen lassen. Diese Fragestellung wurde in den kürzlich erschienenen Publikationen [133,134] untersucht mit dem Ergebnis, dass die erste dipol-induzierte Resonanz auftritt, wenn die relative Stärke der Dipol-wechselwirkung

$$\epsilon_{DD} \equiv \frac{\mu_0 m^2 M}{12\pi\hbar^2 a} \quad (4.91)$$

den Wert $\epsilon_{DD} \approx 2.8$ erreicht. Zum Vergleich beträgt ihre Stärke im ^{52}Cr -Experiment [16] gerade mal $\epsilon_{DD} \approx 0.144$. Damit ist gesichert, dass zumindest dort keine dipol-induzierten Feshbach-Resonanzen zu verzeichnen sind und die Näherung (4.89) ohne Einschränkung gilt.

4.3 Kritische Temperatur in dipolaren Bose-Gasen

Die meisten statistischen und dynamischen Eigenschaften der idealen Bose-Gase sind sehr gut bekannt und lassen nur wenige Fragestellungen offen. Doch Wechselwirkungen bringen neue interessante Aspekte ins Spiel, insbesondere seitdem es so wirkungsvolle Methoden der Steuerung ihrer Stärke gibt wie die Feshbach-Resonanzen. Dennoch beschränkt sich ein Großteil der Untersuchungen in wechselwirkenden bosonischen Systemen auf ihre dynamische Eigenschaften. Dazu gehören sicherlich Untersuchungen ihrer suprafluiden Eigenschaften [135,136] und der Eigenmoden ihrer Schwingungen [65,137,138]. Weitere interessante dynamische Effekte wurden mit Erzeugung des dipolaren Bose-Einstein-Kondensates an ^{52}Cr -Atomen möglich [16]. Charakteristische anisotrope Deformationen wurden experimentell beobachtet [139] und neuartige Maxon-Roton-Anregungen vorhergesagt [140]. Aber auch die grundlegenden Fragen nach der dynamischen Stabilität in Anwesenheit der Dipol-Wechselwirkung wurden zum Objekt der Diskussion [121,131,141,142]. Dennoch werden in den theoretischen Untersuchungen dieser Eigenschaften alle thermodynamischen Effekte vernachlässigt, welche die Dynamik selbst bei niedrigen Temperaturen im Bose-Einstein-kondensierten Bereich dämpfen können.

Eine Reihe von Arbeiten beschäftigt sich auch mit dem Einfluss schwacher Wechselwirkungen auf die thermodynamischen Eigenschaften der Bose-Gase, siehe z. B. [65,143–147]. Als besonders interessant erweist sich dabei die Frage nach der Fluktuation der Teilchenzahl. Aber auch die Frage nach den wechselwirkungs-bedingten Abweichungen der kritischen Temperatur ist von grundsätzlichem Interesse. Es ist eine bekannte Tatsache, dass eine schwache Teilchen-Abstoßung

in homogenen Systemen die Kondensation begünstigt, weil sich Teilchen im gleichen Zustand schwächer abstoßen, als wenn sie sich in verschiedenen Zuständen befinden. In homogenen Systemen sind abstoßende Wechselwirkungen im diesem Sinne attraktiv im Impulsraum [85,148]. Damit vergrößert sich mit stärkeren Abstoßungen auch die kritische Temperatur [149–151]. Quantitative Berechnung dieser Temperatur-Verschiebung ist allerdings nicht trivial, weil in einem homogenen System alle störungstheoretischen Ausdrücke an Infrarot-Divergenzen leiden. Im Rahmen der Variations-Störungs-Theorie [50,152] lassen sie sich jedoch resumieren und ergeben endliche Korrekturen der kritischen Temperatur, so zumindest für genügend schwache Abstoßungen. Doch mit weiter steigenden Wechselwirkungs-Stärken kommt ein Konkurrenz-Prozess zum Tragen, nämlich die so genannte Bogoliubov-Entleerung des Grundzustandes durch die Quanten-Fluktuationen. Sie reduzieren den Anteil der Teilchen im Grundzustand und somit auch die kritische Temperatur. Ab einer bestimmten Wechselwirkungs-Stärke gewinnt dieser Prozess die Oberhand und es kommt zum in Ref. [153,154] vorhergesagten Wiedereintritt-Effekt. Dabei kondensiert das Bose-Gas bei einer festen Temperatur etwas oberhalb des kritischen wechselwirkungsfreien Wertes, wenn die Wechselwirkungs-Stärke einen bestimmten unteren kritischen Wert überschreitet. Bei einer weiteren Erhöhung dieser Stärke über den oberen kritischen Wert verliert das System seine Fähigkeit zu Kondensieren wieder.

Etwas einfacher stellt sich die Situation im experimentell relevanten Fall des harmonischen Hintergrund-Potentials dar. Hier lässt sich die kritische Temperatur störungstheoretisch berechnen, weil die für homogene Systeme typischen Infrarot-Divergenzen hier durch die Anwesenheit der Falle eliminiert werden. Die Kondensation in einer Falle wird durch einen stark lokalisierten Kondensatpeak in der Fallmitte begleitet. Der Argumentation in Ref. [65] zufolge sind hier Wechselwirkungen zwischen den Kondensat-Teilchen aufgrund einer höheren Dichte häufiger, als zwischen den Teilchen in der wesentlich dünneren thermischen Wolke. Daher schmelzen hier Energie-Unterschiede zwischen dem Grundzustand und den thermisch angeregten Zuständen eher zusammen, und die Anregungen aus dem Kondensat werden begünstigt. Dies äußert sich in einer Reduktion der kritischen Temperatur gegenüber dem idealen Fall, die bereits in der niedrigsten störungstheoretischen Ordnung gefunden werden konnte [143,155]. Dieses Resultat wurde kürzlich auch experimentell bestätigt [156]. Eine weiterführende quantitative Diskussion betreffend der kritischen Temperatur ist in Ref. [157] oder im Übersichtsartikel [68] zu finden.

Alle oben genannten thermodynamischen Untersuchungen beschränkten sich auf die Auswirkungen der richtungsunabhängigen Kontakt-Wechselwirkung (4.84). Wir gehen in der anschließenden Diskussion dieses Abschnitts etwas weiter und berücksichtigen den zusätzlichen Einfluss der anisotropen dipolaren Wechselwirkung (4.85). Die wichtigsten Punkte der Rechnung dazu wurden in den Publikationen [46,47] dargelegt und werden hier nochmals zusammenfassend dargestellt. Dabei beschränken wir uns auf den zur Zeit experimentell relevanten Spezialfall verdünnter Bose-Gase in einer harmonischen Falle der allgemeinstmöglichen Form (1.7).

Durch die Anisotropie der Falle sind in dipolar wechselwirkenden Systemen nicht triviale Effekte zu erwarten, zumindest wenn alle Teilchen spinpolarisiert sind und somit gleichgerichtete Dipolmomente besitzen. Dazu betrachten wir die Situation in Abb. 4.2, wo die Dipolmomente entlang der drei verschiedenen Symmetrie-Achsen des äußeren Fallen-Potentials ausgerichtet sind.

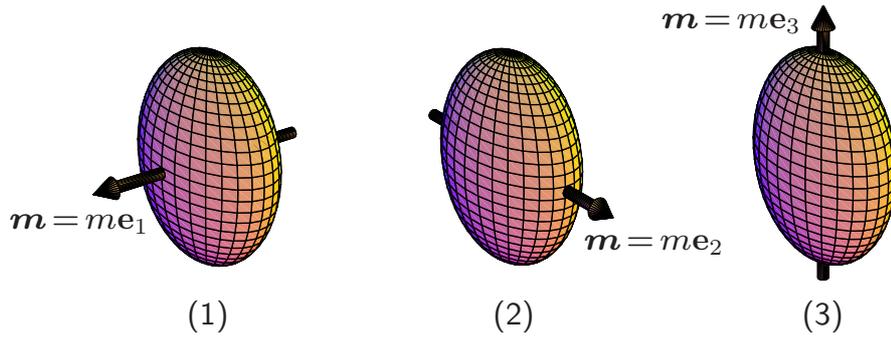


Abbildung 4.2: Verschiedene Ausrichtungen der magnetischen Dipole in einem total anisotropen harmonischen Fallen-Potential (1.7) mit Frequenzen $\omega_1 > \omega_2 > \omega_3$.

Die asymmetrischen Ellipsoide in Abb. 4.2 repräsentieren die modellhafte Kondensatform in dem gegebenen Potential, so dass stärkeren Verengungen in Richtung der größeren Frequenzen zum Ausdruck kommen. Die Anisotropie der Dipol-Dipol-wechselwirkung (4.85) äußert sich nun darin, dass die entlang einer Linie ausgerichteten Dipolmomente ($\mathbf{m} \parallel \mathbf{x}$) sich effektiv anziehen und die nebeneinander parallel aufgestellten Dipolmomente ($\mathbf{m} \perp \mathbf{x}$) sich abstoßen. Die erste Situation trifft nun vorwiegend auf die dritte Einstellung in Abb. 4.2 zu, während die zweite eher für die erste Einstellung in Abb. 4.2 typisch ist. Die Anziehung würde erwartungsgemäß die kritische Temperatur erhöhen, während die Abstoßung sie weiterhin reduzieren würde. Zu erwarten wäre weiterhin auch, dass die Unterschiede in den kritischen Temperaturen bei verschiedenen Orientierungen der Dipole nur auf die Anisotropie der dipolaren wechselwirkung zurückzuführen sind.

Die Aufgabe der weiteren Ausführung dieses Abschnitts besteht nun darin, die qualitativen Erwartungen durch eine quantitative Analyse zu bestätigen und auch dahingehend zu verfeinern, die optimalen experimentellen Einstellungen zu liefern. Das Gerüst der theoretischen Untersuchungen bildet hierbei die im Abschnitt 4.1.5 entwickelte Hartree-Fock-Molekularfeld-Näherung, die wir in der ersten störungstheoretischen Ordnung auswerten. Durch die Verwendung der semiklassischen Näherung werden diese analytischen Rechnungen noch erheblich erleichtert.

4.3.1 Semiklassische Näherung

Bevor wir zur Berechnung der Wechselwirkungs-Beiträge der Selbstenergie und des großkanonischen Potentials im nächsten Unterabschnitt 4.3.2 übergehen, diskutieren wir hier die dazu benötigte semiklassische Näherung. Zuerst geben wir den wechselwirkungsfreien Propagator des harmonischen Oszillators in der Form an, mit der wir ihn für die besagten Rechnungen verwenden. Es wird sich dabei zeigen, dass sich seine Ortsabhängigkeit mit Hilfe von Schwerpunkt- und Relativ-Koordinaten schreiben lässt. Letztere können noch mit Hilfe der Fourier-Transformation als konjugierte Variablen des Impulses dargestellt werden. Die weitere Fourier-Transformation in der Imaginärzeit ergibt die Spektral-Darstellung des freien Propagators in der semiklassischen

Näherung. Unter der Prämisse, dass der Propagator am kritischen Punkt divergiert, bestimmen wir anschließend das Kriterium für das Einsetzen der Kondensation im wechselwirkungsfreien Fall. Welche Relevanz eine solche semiklassische Behandlung hat, zeigten bereits die wechselwirkungsfreien Rechnungen im Abschnitt 2.3. Wie wir daraus nämlich wissen, liefert diese Näherung insbesondere für große Teilchenzahlen N gute Ergebnisse, so dass die kritische Temperatur z.B. bereits bei $N = 1000$ akkurat wiedergegeben ist.

Wir beginnen hier mit dem semiklassischen Ausdruck für den freien Propagator (2.225), in dem wir den darin explizit vorkommenden Grundzustands-Anteil entsprechend der Beziehung

$$G_G^{(0)}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) \approx 0 \quad (4.92)$$

praktisch vernachlässigen. Da wir uns des Weiteren auf den kritischen Punkt konzentrieren, an dem sich der Grundzustand noch nicht in einem makroskopischen Maßstab ausgebildet hat, wird diese Näherung insbesondere im Limes großer Teilchenzahlen gut erfüllt. Die weiteren Beiträge zum Propagator (2.225) schreiben wir mit Hilfe der Schwerpunkts-Koordinaten $\mathbf{X} \equiv (\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2)/2$ und der Relativ-Koordinaten $\mathbf{x}' \equiv \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$ um. Bemerken wir noch, dass die Schwerpunkts-Koordinaten \mathbf{X} in (2.225) ausschließlich in der Form $M \sum_{j=1}^3 \omega_j^2 X_j^2 / 2 = V(\mathbf{X})$ vorkommen, welche dem Potential am Schwerpunkt entspricht, so erhalten wir

$$\begin{aligned} G^{(0)}\left(\mathbf{X} + \frac{\mathbf{x}'}{2}, \tau_1; \mathbf{X} - \frac{\mathbf{x}'}{2}, \tau_2\right) &\approx \lim_{\eta \searrow 0} \left\{ \Theta(\tau_1 - \tau_2 - \eta \hbar \beta) \sum_{n=0}^{\infty} + \Theta(\tau_2 - \tau_1 + \eta \hbar \beta) \sum_{n=1}^{\infty} \right\} \\ &\times \frac{1}{\lambda^3} e^{\beta \hat{\mu}(n + \frac{\tau_1 - \tau_2}{\hbar \beta})} \left(\frac{\hbar \beta}{n \hbar \beta + \tau_1 - \tau_2} \right)^{3/2} \exp \left\{ - \frac{n \hbar \beta + \tau_1 - \tau_2}{\hbar} V(\mathbf{X}) \right\} \\ &\times \exp \left\{ - \frac{M}{2 \hbar (n \hbar \beta + \tau_1 - \tau_2)} \sum_{j=1}^3 \left[(n \hbar \beta + \tau_1 - \tau_2)^2 \omega_j^2 + 1 \right] x_j'^2 \right\}. \quad (4.93) \end{aligned}$$

Der Ausdruck λ steht dabei für die thermodynamische de Broglie-Wellenlänge (4.70) und $\hat{\mu}$ für das chemische Potential abzüglich der Grundzustandsenergie $\hat{\mu} \equiv \mu - E_G$, wie bereits in (2.122) angegeben.

Bemerken wir weiterhin, dass der Ausdruck in der eckigen Klammer des letzten Faktors aus (4.93) in semiklassischer Näherung $\beta \hbar \omega_j \ll 1$ von der eins dominiert wird, so erhalten wir die folgende semiklassische Näherung:

$$\begin{aligned} G^{(0)}\left(\mathbf{X} + \frac{\mathbf{x}'}{2}, \tau_1; \mathbf{X} - \frac{\mathbf{x}'}{2}, \tau_2\right) &\approx \lim_{\eta \searrow 0} \left\{ \Theta(\tau_1 - \tau_2 - \eta \hbar \beta) \sum_{n=0}^{\infty} + \Theta(\tau_2 - \tau_1 + \eta \hbar \beta) \sum_{n=1}^{\infty} \right\} e^{\beta \hat{\mu}(n + \frac{\tau_1 - \tau_2}{\hbar \beta})} \\ &\times \frac{1}{\lambda^3} \left(\frac{\hbar \beta}{n \hbar \beta + \tau_1 - \tau_2} \right)^{3/2} \exp \left\{ - \frac{n \hbar \beta + \tau_1 - \tau_2}{\hbar} V(\mathbf{X}) - \frac{M}{2 \hbar} \frac{\mathbf{x}'^2}{n \hbar \beta + \tau_1 - \tau_2} \right\}. \quad (4.94) \end{aligned}$$

Wie man hier sieht, ist die Schwerpunkts-Koordinate von der Relativ-Koordinate entkoppelt. Damit können wir die letztere in die Impuls-Abhängigkeit nach der Fourier-Transformation

$$G^{(0)}(\mathbf{p}; \mathbf{X}, \tau_1 - \tau_2) \equiv \int d^3 x' e^{-i \mathbf{p} \mathbf{x}' / \hbar} G^{(0)}\left(\mathbf{X} + \frac{\mathbf{x}'}{2}, \tau_1; \mathbf{X} - \frac{\mathbf{x}'}{2}, \tau_2\right) \quad (4.95)$$

umschreiben, so dass ein Ausdruck zurückbleibt, der nur von der Schwerpunkts-Koordinate abhängt. Dieser ergibt sich nun zu

$$G^{(0)}(\mathbf{p}; \mathbf{X}, \tau_1 - \tau_2) \approx \lim_{\eta \searrow 0} \left\{ \Theta(\tau_1 - \tau_2 - \eta \hbar \beta) \sum_{n=0}^{\infty} + \Theta(\tau_2 - \tau_1 + \eta \hbar \beta) \sum_{n=1}^{\infty} \right\} \\ \times \exp \left\{ - \frac{n \hbar \beta + \tau_1 - \tau_2}{\hbar} \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2M} + V(\mathbf{X}) - \hat{\mu} \right] \right\}. \quad (4.96)$$

Da die Imaginärzeiten dabei nur in Form der Differenzen vorkommen, lässt sich für den freien Propagator die folgende Fourier-Matsubara-Darstellung

$$G^{(0)}(\mathbf{p}, \omega_m; \mathbf{X}) \equiv \int_0^{\hbar \beta} d(\tau_1 - \tau_2) e^{i\omega_m(\tau_1 - \tau_2)} G^{(0)}(\mathbf{p}; \mathbf{X}, \tau_1 - \tau_2) \quad (4.97)$$

finden. Im gesamten Integrationsbereich gilt $\tau_1 - \tau_2 > 0$ (mit Ausnahme eines einzigen 0-Punktes vom Maß Null) und somit ist hier die erste n -Summe aus (4.96) zu verwenden. Da sich weiterhin aufgrund der Bedingung (2.38) für die Matsubara-Frequenz die Identität $\omega_m \hbar \beta = 2\pi m$ ergibt, folgt daraus die Spektral-Darstellung des freien Propagators

$$G^{(0)}(\mathbf{p}, \omega_m; \mathbf{X}) = \frac{\hbar}{-i\hbar\omega_m + \mathbf{p}^2/2M + V(\mathbf{X}) - \hat{\mu}}. \quad (4.98)$$

Eine analoge Spektral-Darstellung des Integralkerns (4.6) ist nach den beiden Formeln (4.95) und (4.97) als

$$G^{(0)-1}(\mathbf{p}, \omega_m; \mathbf{X}) \equiv \int_0^{\hbar \beta} d(\tau_1 - \tau_2) \int d^3x' e^{i\omega_m(\tau_1 - \tau_2)} e^{-i\mathbf{p}\mathbf{x}'/\hbar} G^{(0)-1}\left(\mathbf{X} + \frac{\mathbf{x}'}{2}, \tau_1; \mathbf{X} - \frac{\mathbf{x}'}{2}, \tau_2\right) \quad (4.99)$$

darzustellen und ergibt sich zu

$$G^{(0)-1}(\mathbf{p}, \omega_m; \mathbf{X}) \approx \frac{1}{\hbar} \left(-i\hbar\omega_m + \frac{\mathbf{p}^2}{2M} + V(\mathbf{X}) - \hat{\mu} \right). \quad (4.100)$$

Dabei ersetzen wir noch etwas heuristisch das chemische Potential μ durch das reduzierte Potential $\hat{\mu} = \mu - 3\hbar\bar{\omega}/2$, wobei $\bar{\omega} = (\omega_1 + \omega_2 + \omega_3)/3$ das arithmetische Mittel der Frequenzen darstellt. Da der Unterschied von rein quantenmechanischer Natur ist, ist es auch nicht verwunderlich, dass dieser Punkt in der oben präsentierten semiklassischen Rechnung nicht korrekt herausgearbeitet wurde. Durch diese Ersetzung wurde ferner erreicht, dass der Integralkern in seiner Spektral-Darstellung (4.100) explizit reziprok zum freien Propagator (4.98) ist. Diese reziproke Abhängigkeit der beiden Größen wurde übrigens schon in der Funktional-Schreibweise (4.14) allgemein festgestellt.

Nun sind wir in der Lage, den kritischen Punkt zu untersuchen, unterhalb dessen die Teilchen in den Grundzustand kondensieren. Ein solcher Übergang der Teilchen in den Bose-Einstein-kondensierten Zustand äußert sich im Auftreten von Polstellen des Propagators (4.98). Diese treten im gesamten Temperaturbereich unterhalb des gesuchten kritischen Temperaturwertes auf.

Für weitere Untersuchungen bemerken wir noch, dass die Polstellen des Propagators gleichzeitig den Nullstellen seiner Umkehrung (4.100)

$$G^{(0)-1}(\mathbf{p}, \omega_m; \mathbf{X}) = 0 \quad (4.101)$$

entsprechen. Für ein reelles chemisches Potential $\hat{\mu}$ kann diese Gleichung nur für die Matsubara Null-Mode $\omega_m = 0$ erfüllt werden. Da außerdem das chemische Potential eine Konstante darstellt, verschwindet der Kern (4.100) nur für den Impuls $\mathbf{p} = \mathbf{0}$. Die Schwerpunkts-Koordinate soll dabei ebenfalls verschwinden, d.h. $\mathbf{X} = \mathbf{0}$, weil in einer harmonischen Falle (1.7) das Potentialminimum am Ursprung vorliegt. In einem allgemeineren Fall muss es jedoch nicht immer so sein, wie es z.B. in einem überkritisch schnell rotierenden Bose-Gas der Fall ist, wo das Potential die Form eines mexikanischen Huts hat [158]. In einem solchen Fall unterliegt das reduzierte chemische Potential im Bose-Einstein-kondensierten Bereich der allgemeinen Minimum-Bedingung

$$\hat{\mu} = \hat{\mu}_c^{(0)} = \min_{\mathbf{X}} V(\mathbf{X}) , \quad (4.102)$$

wobei wir hier mit $\hat{\mu}_c^{(0)}$ den kritischen Wert des chemischen Potentials in der wechselwirkungsfreien Theorie bezeichneten. Beschränken wir uns weiterhin auf die harmonische Falle, so erhalten wir $\hat{\mu}_c^{(0)} = 0$, und das entspricht einem chemischen Potential, welches dem Grundzustand-Energiewert gleich ist. Das ist auch die aus dem Kapitel 2 bekannte Tatsache, welche im Abschnitt 2.3.1 dafür benutzt wurde, die kritische Temperatur eines idealen Bose-Gases auszuwerten. In der semiklassischen Näherung ergaben sich damit die Resultate (2.134) nullter bzw. (2.135) erster Ordnung.

Im Unterabschnitt 4.3.3 sollen die Berechnungen der kritischen Temperatur auch auf das wechselwirkende Bose-Gas ausgeweitet werden. Doch dazu benötigen wir noch die störungstheoretischen Wechselwirkungs-Beiträge zur Selbstenergie und zum großkanonischen Potential, die im nächsten Unterabschnitt ausgewertet werden.

4.3.2 Selbstenergie- und Vakuum-Diagramme führender Ordnung

Zur Auswertung der Hartree-Fock-Molekularfeld-Näherung (4.63) benötigen wir sowohl die Selbstenergie (4.57) als auch den Wechselwirkungs-Anteil des großkanonischen Potentials (4.59). Wir können sie in der niedrigsten störungstheoretischen Ordnung explizit berechnen, wenn wir die darin vorkommenden Propagatoren \mathbf{G}_{ij} durch die wechselwirkungsfreien Ausdrücke $G_{ij}^{(0)}$ ersetzen. In dieser Näherung schreiben wir die einzelnen Ausdrücke explizit in der Orts-Imaginärzeit-Darstellung aus. Dafür benötigen wir die Vorschriften (4.19) und die Vierer-Wechselwirkung in der Form (4.8), so dass sich

$$\begin{aligned} \Sigma^{(D)}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) &= \mathbf{x}_1 \tau_1 \begin{array}{c} \circ \\ \downarrow \\ \leftarrow \end{array} \mathbf{x}_2 \tau_2 \\ &= -\frac{1}{\hbar} \delta(\tau_1 - \tau_2) \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \int d^3x V^{(\text{int})}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}) G^{(0)}(\mathbf{x}, \tau_1; \mathbf{x}, \tau_1) , \quad (4.103) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Sigma^{(A)}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) &= \mathbf{x}_1 \tau_1 \begin{array}{c} \curvearrowright \\ \leftarrow \end{array} \mathbf{x}_2 \tau_2 \\ &= -\frac{1}{\hbar} \delta(\tau_1 - \tau_2) V^{(\text{int})}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) G^{(0)}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_1) \quad (4.104) \end{aligned}$$

für den direkten und den Austausch-Term der Selbstenergie ergibt. Für die entsprechenden Terme des großkanonischen Potentials gilt

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_{GK}^{(D)} &= -\frac{1}{\beta} W^{(D)} = -\frac{1}{2\beta} \text{Diagram} \\ &= \frac{1}{2\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^3x_1 d^3x_2 G^{(0)}(\mathbf{x}_1, \tau; \mathbf{x}_1, \tau) V^{(\text{int})}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) G^{(0)}(\mathbf{x}_2, \tau; \mathbf{x}_2, \tau),\end{aligned}\quad (4.105)$$

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_{GK}^{(A)} &= -\frac{1}{\beta} W^{(A)} = -\frac{1}{2\beta} \text{Diagram} \\ &= \frac{1}{2\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^3x_1 d^3x_2 G^{(0)}(\mathbf{x}_1, \tau; \mathbf{x}_2, \tau) V^{(\text{int})}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) G^{(0)}(\mathbf{x}_2, \tau; \mathbf{x}_1, \tau).\end{aligned}\quad (4.106)$$

Bei genauerem Hinsehen erkennt man, dass in allen oben genannten störungstheoretischen Ausdrücken erster Ordnung nur die zeitlich lokalen freien Propagatoren vorkommen. Diese lassen sich aus dem semiklassischen Resultat (4.94) zu

$$G^{(0)}(\mathbf{x}_1, \tau; \mathbf{x}_2, \tau) \approx \frac{1}{\lambda^3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{n\beta\hat{\mu}}}{n^{3/2}} \exp \left\{ -\frac{n\beta M}{8} \sum_{j=1}^3 \omega_j^2 (x_{1j} + x_{2j})^2 - \frac{M(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)^2}{2n\hbar^2\beta} \right\} \quad (4.107)$$

reduzieren. Für die weiteren Berechnungen verwenden wir noch die Fourier-Transformierte des Wechselwirkungspotentials $V^{(\text{int})}(\mathbf{q})$ und erhalten die Beiträge des großkanonischen Potentials (4.105) und (4.106)

$$\mathcal{F}_{GK}^{(D)} = \frac{1}{2(2\pi\hbar)^3(\beta\hbar\tilde{\omega})^6} \sum_{n, n'=1}^{\infty} \frac{e^{(n+n')\beta\hat{\mu}}}{n^3 n'^3} \int d^3q V^{(\text{int})}(\mathbf{q}) \exp \left\{ -\frac{n+n'}{2\hbar^2\beta M n n'} \sum_{j=1}^3 \frac{q_j^2}{\omega_j^2} \right\}, \quad (4.108)$$

$$\mathcal{F}_{GK}^{(A)} = \frac{1}{2(2\pi\hbar)^3(\beta\hbar\tilde{\omega})^3} \sum_{n, n'=1}^{\infty} \frac{e^{(n+n')\beta\hat{\mu}}}{(n+n')^3} \int d^3q V^{(\text{int})}(\mathbf{q}) \exp \left\{ -\frac{\beta n n'}{2M(n+n')} \mathbf{q}^2 \right\}, \quad (4.109)$$

wobei wir hier noch das geometrische Mittel der Frequenzen $\tilde{\omega} \equiv (\omega_1\omega_2\omega_3)^{1/3}$ aus (2.130) verwendet haben. Die Selbstenergie-Beiträge (4.103) und (4.104) lassen sich prinzipiell analog dazu berechnen. Da uns allerdings für weitere Untersuchungen nur ihre Spektral-Darstellungen interessieren, geben wir sie gleich in der Fourier-Matsubara-transformierten Form an. Die jeweiligen Selbstenergie-Terme lassen sich in Analogie zur Darstellung des Integral-Kerns (4.99) berechnen und lauten

$$\begin{aligned}\Sigma^{(D)}(\mathbf{p}, \omega_m; \mathbf{X}) &= -\frac{1}{\hbar(2\pi\hbar)^3(\beta\hbar\tilde{\omega})^3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{n\beta\hat{\mu}}}{n^3} \int d^3q V^{(\text{int})}(\mathbf{q}) \\ &\quad \times \exp \left\{ -\frac{1}{2\hbar^2\beta M n} \sum_{j=1}^3 \frac{q_j^2}{\omega_j^2} - \frac{i}{\hbar} \mathbf{q} \cdot \mathbf{X} \right\},\end{aligned}\quad (4.110)$$

$$\begin{aligned} \Sigma^{(A)}(\mathbf{p}, \omega_m; \mathbf{X}) = & -\frac{1}{\hbar(2\pi\hbar)^3} \sum_{n=1}^{\infty} e^{n\beta\hat{\mu}} \exp \left\{ -\frac{n\beta M}{2} \sum_{j=1}^3 \omega_j^2 X_j^2 \right\} \\ & \times \int d^3q V^{(\text{int})}(\mathbf{q}) \exp \left\{ -\frac{n\beta}{2M} (\mathbf{q} + \mathbf{p})^2 \right\}. \end{aligned} \quad (4.111)$$

Zur weiteren Verwendung von (4.110) und (4.111) sei auf den nächsten Unterabschnitt 4.3.3 verwiesen.

Des Weiteren konzentrieren wir uns auf die Berechnung der direkten und Austausch-Vakuum-Diagramme (4.108) und (4.109). Dabei spezifizieren wir das Wechselwirkungs-Potential auf die im Abschnitt 4.2 diskutierte Summe der Kontakt- und Dipol-Dipol-Wechselwirkung (4.89). Die Fourier-Transformierte der Kontakt-Wechselwirkung (4.84) wird dabei durch die reine Konstante $V^{(\text{int})}(\mathbf{q}) = 4\pi\hbar^2 a_s/M$ dargestellt. Diejenige der Dipol-Dipol-Wechselwirkung haben wir bereits mit (4.86) angegeben. Verwenden wir nun das räumlich feste Koordinatensystem mit den Achsen parallel zu den Symmetrie-Achsen des Fallen-Potentials in Abb. 4.2, so können wir darin das magnetische Dipolmoment in Kugelkoordinaten als $\mathbf{m} = m (\sin \alpha \cos \phi, \sin \alpha \sin \phi, \cos \alpha)$ schreiben. Damit ergibt sich die Fourier-Darstellung von (4.89)

$$\begin{aligned} V^{(\text{int})}(\mathbf{q}) = & \mu_0 m^2 \left\{ \frac{1}{3\epsilon_{DD}} - \frac{1}{3} + \sin^2 \alpha \left(\frac{q_1^2}{q^2} \cos^2 \phi + \frac{q_2^2}{q^2} \sin^2 \phi \right) + \frac{q_3^2}{q^2} \cos^2 \alpha \right. \\ & \left. + 2 \sin \alpha \cos \alpha \left(\frac{q_1 q_3}{q^2} \cos \phi + \frac{q_2 q_3}{q^2} \sin \phi \right) + 2 \sin^2 \alpha \frac{q_1 q_2}{q^2} \sin \phi \cos \phi \right\}, \end{aligned} \quad (4.112)$$

wobei wir hier noch die Abkürzung ϵ_{DD} für die relative dipolare Wechselwirkungs-Stärke (4.91) mit dem effektiven Parameter (4.90) verwendet haben.

Für weitere Untersuchungen definieren wir eine Abkürzung für das in verschiedenen Ausführungen auftretende Master-Integral

$$I^{(\text{int})} \left(\frac{a_1}{a_2}, \frac{a_1}{a_3} \right) = \frac{3}{\mu_0 m^2 a_1 a_2 a_3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_1 dq_2 dq_3}{\pi^{3/2}} V^{\text{int}}(\mathbf{q}) \exp \left\{ -\frac{q_1^2}{a_1^2} - \frac{q_2^2}{a_2^2} - \frac{q_3^2}{a_3^2} \right\}. \quad (4.113)$$

Dabei nehmen wir hier vorweg, dass diese Form nur von den Quotienten der Parameter a_1 , a_2 und a_3 abhängt, was natürlich nicht sofort klar und deshalb noch zu verifizieren ist. Die Beiträge (4.108) und (4.109) lassen sich damit als

$$\mathcal{F}_{GK}^{(D)} = \frac{\mu_0 m^2}{6(\beta\hbar\tilde{\omega})^3 \lambda^3} \zeta_{\frac{3}{2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}}(e^{\beta\hat{\mu}}) I^{(\text{int})} \left(\frac{\omega_1}{\omega_2}, \frac{\omega_1}{\omega_3} \right), \quad (4.114)$$

$$\mathcal{F}_{GK}^{(A)} = \frac{\mu_0 m^2}{6(\beta\hbar\tilde{\omega})^3 \lambda^3} \zeta_{\frac{3}{2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}}(e^{\beta\hat{\mu}}) I^{(\text{int})}(1, 1) \quad (4.115)$$

schreiben, wobei hier die thermische Wellenlänge (4.70) und als weitere Abkürzung die verallgemeinerte polylogarithmische Funktion

$$\zeta_{a,b,c}(z) \equiv \sum_{n,n'=1}^{\infty} \frac{z^{n+n'}}{n^a n^b (n+n')^c} \quad (4.116)$$

verwendet wurde. Bevor wir uns in der anschließenden Diskussion mit dem Lösen des Integrals (4.113) beschäftigen, beschränken wir uns zuerst auf die speziellen Einstellungen des Dipolmoments \mathbf{m} aus Abb. 4.2 und definieren dafür das Teilproblem

$$I^{(j)}\left(\frac{a_1}{a_2}, \frac{a_1}{a_3}\right) = \frac{3}{a_1 a_2 a_3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_1 dq_2 dq_3}{\pi^{3/2}} \left(\frac{1}{3 \epsilon_{DD}} - \frac{1}{3} + \frac{q_j^2}{\mathbf{q}^2} \right) \exp \left\{ -\frac{q_1^2}{a_1^2} - \frac{q_2^2}{a_2^2} - \frac{q_3^2}{a_3^2} \right\}. \quad (4.117)$$

Die allgemeine Form (4.113) lässt sich darauf zurückführen. Es gibt zwar in der Wechselwirkung (4.112) noch Anteile von der Form $q_i q_j / \mathbf{q}^2$ mit $i \neq j$, die durch (4.117) nicht erfasst werden. Aufgrund der Symmetrie des Integrandes aus (4.113) verschwinden allerdings alle solche Terme, so dass sich das Gesamtproblem auf

$$\begin{aligned} I^{(\text{int})}\left(\frac{a_1}{a_2}, \frac{a_1}{a_3}\right) &= \sin^2 \alpha \cos^2 \phi I^{(1)}\left(\frac{a_1}{a_2}, \frac{a_1}{a_3}\right) + \sin^2 \alpha \sin^2 \phi I^{(2)}\left(\frac{a_1}{a_2}, \frac{a_1}{a_3}\right) \\ &\quad + \cos^2 \alpha I^{(3)}\left(\frac{a_1}{a_2}, \frac{a_1}{a_3}\right) \end{aligned} \quad (4.118)$$

reduziert. Daraus kann man unmittelbar erkennen, dass das volle Wechselwirkungs-Integral für beliebige Parameter a_j genau dann ihre Extremalwerte annimmt, wenn das Dipolmoment \mathbf{m} in Richtung der jeweiligen Symmetrieachsen der Falle zeigt. Genau diese Extremalfälle sind in Abb. 4.2 schematisch dargestellt. Dabei treten folgende Raumwinkel und entsprechende Spezifizierungen des Integrals (4.118) auf:

$$I^{(\text{int})}\left(\frac{a_1}{a_2}, \frac{a_1}{a_3}\right) = \begin{cases} I^{(1)}\left(\frac{a_1}{a_2}, \frac{a_1}{a_3}\right), & \alpha = \pi/2, \quad \phi = 0, \pi, \\ I^{(2)}\left(\frac{a_1}{a_2}, \frac{a_1}{a_3}\right), & \alpha = \pi/2, \quad \phi = \pi/2, 3\pi/2, \\ I^{(3)}\left(\frac{a_1}{a_2}, \frac{a_1}{a_3}\right), & \alpha = 0, \quad \phi \text{ beliebig.} \end{cases} \quad (4.119)$$

Ob diese Extrema allerdings die Maxima oder Minima ergeben, lässt sich nicht sofort beantworten, sondern hängt von den konkreten Koeffizienten $I^{(j)}$ ab. Des Weiteren müssen wir sie allerdings nicht alle einzeln berechnen, denn zwischen ihnen liegen noch folgende Beziehungen vor:

$$I^{(2)}\left(\frac{a_1}{a_2}, \frac{a_1}{a_3}\right) = I^{(1)}\left(\frac{a_2}{a_3}, \frac{a_2}{a_1}\right), \quad I^{(3)}\left(\frac{a_1}{a_2}, \frac{a_1}{a_3}\right) = I^{(1)}\left(\frac{a_3}{a_1}, \frac{a_3}{a_2}\right), \quad (4.120)$$

welche sich unmittelbar aus der allgemeinen Form (4.117) ableiten lassen. Damit brauchen wir lediglich einen einzigen Spezialfall explizit auszuwerten und nehmen dafür beispielsweise den mit $j=1$.

Zur Ausführung der Integration (4.117) verwenden wir für den Term \mathbf{q}^{-2} die so genannte Schwingersche Eigenzeit-Darstellung

$$\frac{1}{\mathbf{q}^2} = \int_0^{\infty} d\tau e^{-\tau \mathbf{q}^2}, \quad (4.121)$$

die wir aus der allgemeineren Formel (2.76) mit der Potenz $x = 1$ gewinnen. Damit reduziert sich (4.117) nach der Impuls-Integration zu

$$I^{(1)}\left(\frac{a_1}{a_2}, \frac{a_1}{a_3}\right) = \frac{1}{\epsilon_{DD}} - 1 + \frac{3}{2a_1a_2a_3} \int_0^\infty \frac{d\tau}{(\tau + 1/a_1^2)^{3/2} (\tau + 1/a_2^2)^{1/2} (\tau + 1/a_3^2)^{1/2}} . \quad (4.122)$$

Das noch übrig gebliebene τ -Integral lässt sich ferner mit Hilfe der unvollständigen elliptischen Funktionen erster und zweiter Art [61, (8.111)] darstellen:

$$F(\phi, k) \equiv \int_0^{\sin \phi} \frac{dx}{(1-x^2)^{1/2} (1-k^2x^2)^{1/2}} , \quad E(\phi, k) \equiv \int_0^{\sin \phi} \frac{dx (1-k^2x^2)^{1/2}}{(1-x^2)^{1/2}} . \quad (4.123)$$

Damit ergibt sich das Master-Integral (4.122) zu

$$I^{(1)}\left(\frac{a_1}{a_2}, \frac{a_1}{a_3}\right) = \frac{1}{\epsilon_{DD}} - f\left(\frac{a_1}{a_2}, \frac{a_1}{a_3}\right) , \quad (4.124)$$

wobei die Anisotropie-Funktion f eine noch weiter zu spezifizierende Kombination der elliptischen Integrale (4.123) darstellt. So ergibt sie sich für den Fall $a_1 < a_2, a_3$ nach der Substitution $\tau \equiv (1/a_1^2 - 1/a_2^2)/x^2 - 1/a_1^2$ zu

$$f(\eta, \kappa) = 1 + \frac{3\kappa\eta}{\sqrt{1-\kappa^2} (1-\eta^2)} \left\{ E\left(\arcsin\sqrt{1-\kappa^2}, \frac{\sqrt{1-\eta^2}}{\sqrt{1-\kappa^2}}\right) - F\left(\arcsin\sqrt{1-\kappa^2}, \frac{\sqrt{1-\eta^2}}{\sqrt{1-\kappa^2}}\right) \right\} \quad \text{für } \kappa, \eta < 1 . \quad (4.125)$$

Für den Fall $a_3 < a_2 < a_1$ muss diese Funktion allerdings mit Hilfe von [61, (8.127)] analytisch fortgesetzt werden und lautet danach

$$f(\eta, \kappa) = \frac{1+2\eta^2}{1-\eta^2} - \frac{3\kappa\eta}{(1-\eta^2)(\kappa^2-1)} \left\{ \sqrt{\kappa^2-\eta^2} E\left(\arcsin\frac{\sqrt{\kappa^2-\eta^2}}{\kappa}, \frac{\sqrt{\kappa^2-1}}{\sqrt{\kappa^2-\eta^2}}\right) - \frac{1-\eta^2}{\sqrt{\kappa^2-\eta^2}} F\left(\arcsin\frac{\sqrt{\kappa^2-\eta^2}}{\kappa}, \frac{\sqrt{\kappa^2-1}}{\sqrt{\kappa^2-\eta^2}}\right) \right\} \quad \text{für } 1 < \eta < \kappa . \quad (4.126)$$

Für den Spezialfall $a_2 < a_3 < a_1$ ist die Situation analog zu der gerade behandelten, lediglich die Parameter tauschen ihre Rollen, d.h. hierfür ist die Ersetzung $\eta \leftrightarrow \kappa$ vorzunehmen. Die Anisotropie-Funktion $f(\eta, \kappa)$ aus (4.125) und (4.126) spielte interessanterweise bereits bei Null-Temperatur-Untersuchungen der dynamischen Ausbreitung einer dipolaren Gas-Wolke eine wichtige Rolle [159]. Ebenfalls dort wurden noch einige wichtige Symmetrie-Eigenschaften dieser Funktion angegeben:

$$f(\eta, \kappa) = f(\kappa, \eta) , \quad f(\eta, \kappa) + f\left(\frac{\kappa}{\eta}, \frac{1}{\eta}\right) + f\left(\frac{1}{\kappa}, \frac{\eta}{\kappa}\right) = 0 . \quad (4.127)$$

Abschließend ist diese Funktion noch für die zylinder-symmetrische Fallen-Konfigurationen auszuwerten. Durch die entsprechenden Reihendarstellungen der elliptischen Funktionen erhalten wir dafür

$$f(\kappa, \kappa) = -2f(1, 1/\kappa) \equiv f_s(\kappa) , \quad (4.128)$$

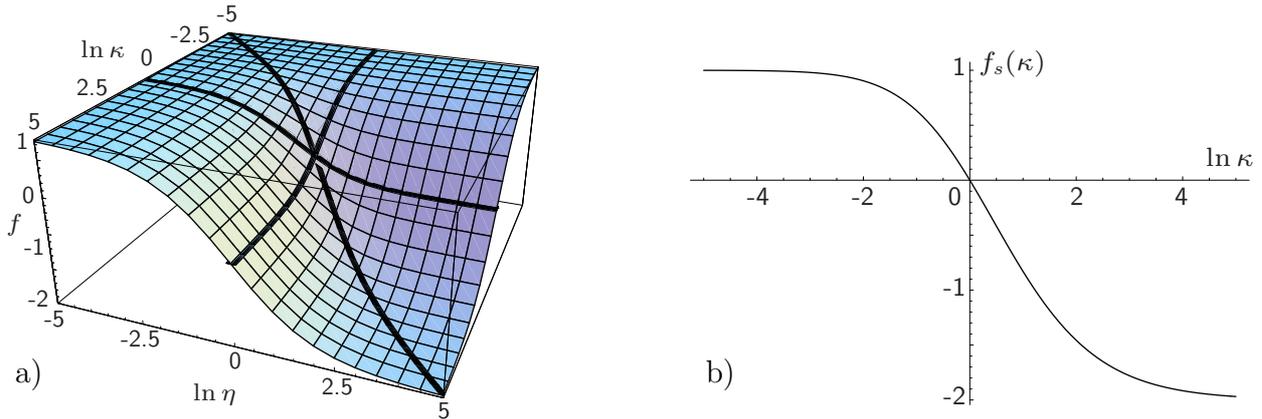


Abbildung 4.3: a) Logarithmische Darstellung der Anisotropie-Funktion $f(\eta, \kappa)$ aus (4.125) und (4.126). Schwarze Kurven stellen Spezialfälle aus (4.128) dar, so repräsentiert die Querlinie die Funktion $f(\kappa, \kappa)$ und die Linien parallel zu den Koordinatenachsen $f(1, \kappa)$ und $f(\eta, 1)$. b) Logarithmische Darstellung der Zylinder-symmetrischen Anisotropie-Funktion $f_s(\kappa)$ aus (4.129). Abbildungen wie in [47] für a) bzw. [46] für b).

wobei wir hier die halb-symmetrische Anisotropie-Funktion [46,131,142,160]

$$f_s(\kappa) = \begin{cases} \frac{2\kappa^2 + 1}{1 - \kappa^2} - \frac{3\kappa^2}{(1 - \kappa^2)^{3/2}} \operatorname{artanh} \sqrt{1 - \kappa^2} & , \quad 0 < \kappa < 1 \\ 0 & , \quad \kappa = 1 \\ -\frac{2\kappa^2 + 1}{\kappa^2 - 1} + \frac{3\kappa^2}{(\kappa^2 - 1)^{3/2}} \arctan \sqrt{\kappa^2 - 1} & , \quad \kappa > 1 \end{cases} \quad (4.129)$$

verwenden. Diese Funktion konvergiert im Grenzbereich $\kappa \rightarrow \infty$ gegen -2 und für $\kappa \rightarrow 0$ gegen den Wert 1 . Weitere Details zur vollen Anisotropie-Funktion f aus (4.125) bzw. (4.126) sowie zu ihrem halb-symmetrischen Spezialfall f_s aus (4.129) sind der Abb. 4.3 zu entnehmen. Im anschließenden Unterabschnitt werden wir diese Funktion verwenden, um den Effekt der anisotropen Dipol-Wechselwirkung auf die kritische Temperatur in einem verdünnten Bose-Gas zu berechnen.

4.3.3 Berechnung der kritischen Temperatur

In diesem Unterabschnitt berücksichtigen wir den Einfluss der Wechselwirkung auf die thermodynamische Größen. Weiterhin spezifizieren wir hier das Kriterium für den kritischen Kondensationspunkt in Anwesenheit der Wechselwirkung. Die beiden Wechselwirkungs-Effekte führen zur Verschiebung der kritischen Temperatur. Die dabei angewendete Vorgehensweise wurde in den Publikationen [46,47] dargestellt und liefert die Verallgemeinerung des Resultats aus [65,143] für den Fall dipolar wechselwirkender Bose-Gase.

Bevor wir zur Bestimmung des kritischen Punktes übergehen, stellen wir hier die thermodynamischen Gleichungen auf, welche in der anschließenden Diskussion von entscheidender Bedeutung sein werden. Als Ausgangspunkt dient uns dabei das großkanonische Potential (4.65) mit dem

wechselwirkungsfreien Anteil $\mathcal{F}_{GK}^{(0)}$ aus dem semiklassischen Resultat in der führenden Ordnung (2.131). Mit den beiden Wechselwirkungs-Beiträgen (4.114) und (4.115) erhalten wir

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{GK} = & \frac{1}{\beta} \ln [1 - e^{\beta\hat{\mu}}] - \frac{1}{\beta(\beta\hbar\tilde{\omega})^3} \zeta_4(e^{\beta\hat{\mu}}) - \frac{3\beta\hbar\tilde{\omega}}{2\beta(\beta\hbar\tilde{\omega})^3} \zeta_3(e^{\beta\hat{\mu}}) \\ & + \frac{\mu_0 m^2}{6\lambda^3(\beta\hbar\tilde{\omega})^3} \left[I^{(\text{int})} \left(\frac{\omega_1}{\omega_2}, \frac{\omega_1}{\omega_3} \right) + I^{(\text{int})}(1, 1) \right] \zeta_{\frac{3}{2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}}(e^{\beta\hat{\mu}}) + \dots \quad (4.130) \end{aligned}$$

Die ersten drei Terme repräsentieren wechselwirkungsfreie Beiträge und stehen für den Anteil der Grundzustands- und thermischer Teilchen in der nullten und ersten semiklassischen Ordnung. Die beiden letzten Summanden sind die Wechselwirkungs-Korrekturen vom direkten und dem Austausch-Term. Interessanterweise besitzt der zuletzt Genannte keine Abhängigkeit von der Anisotropie der Wechselwirkung, wodurch er sich deutlich vom direkten Term unterscheidet. Aus der Gleichung (4.130) lässt sich nach der Beziehung $N = -\partial\mathcal{F}_{GK}/\partial\hat{\mu}$ die Teilchenzahl

$$\begin{aligned} N = & N_{\mathbf{0}}^{(0)} + \frac{1}{(\beta\hbar\tilde{\omega})^3} \zeta_3(e^{\beta\hat{\mu}}) + \frac{3\beta\hbar\tilde{\omega}}{(\beta\hbar\tilde{\omega})^3} \zeta_2(e^{\beta\hat{\mu}}) \\ & - \frac{\mu_0 m^2 \beta}{3\lambda^3(\beta\hbar\tilde{\omega})^3} \left[I^{(\text{int})} \left(\frac{\omega_1}{\omega_2}, \frac{\omega_1}{\omega_3} \right) + I^{(\text{int})}(1, 1) \right] \zeta_{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}}(e^{\beta\hat{\mu}}) + \dots \quad (4.131) \end{aligned}$$

ableiten, wobei wir hierfür noch die aus (4.116) folgende Beziehung $\zeta_{\frac{3}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}}(z) = 2\zeta_{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}}(z)$ verwendeten. Der erste Summand $N_{\mathbf{0}}^{(0)}$ steht dabei für die Grundzustands-Teilchenzahl im idealen Fall (2.125). Mit der kritischen Temperatur des idealen Gases im thermodynamischen Limes (2.134) lässt sich die Gleichung (4.131) noch weiterhin umformen zu

$$\begin{aligned} 1 = & \frac{N_{\mathbf{0}}^{(0)}}{N} + \left(\frac{T}{T_c^{(0)}} \right)^3 \frac{\zeta_3(e^{\beta\hat{\mu}})}{\zeta(3)} + \frac{3\tilde{\omega}}{2\tilde{\omega}N^{1/3}} \left(\frac{T}{T_c^{(0)}} \right)^2 \frac{\zeta_2(e^{\beta\hat{\mu}})}{\zeta^{2/3}(3)} \\ & - \frac{\mu_0 m^2 \beta}{3\lambda^3} \left(\frac{T}{T_c^{(0)}} \right)^3 \left[I^{(\text{int})} \left(\frac{\omega_1}{\omega_2}, \frac{\omega_1}{\omega_3} \right) + I^{(\text{int})}(1, 1) \right] \frac{\zeta_{1/2, 3/2, 3/2}(e^{\beta\hat{\mu}})}{\zeta(3)} + \dots \quad (4.132) \end{aligned}$$

Der erste Term auf der rechten Seite steht dabei für den Anteil der Teilchen im Grundzustand der freien Theorie, der zweite und dritte für diejenigen der thermisch angeregten Teilchen ohne Wechselwirkung, und nur die letzten beiden Summanden repräsentieren den Anteil der wechselwirkenden Teilchen. Doch das vermittelt ein grundsätzlich falsches Bild über die Zusammenhänge in realen Systemen, denn eigentlich wechselwirken alle Gas-Teilchen miteinander permanent, wenn auch nur schwach.

Zur geeigneten Korrektur des störungstheoretischen Bildes verwenden wir an dieser Stelle die Selbstenergie-Renormierung des Energie-Spektrums (siehe dazu auch die grundsätzliche Diskussion in Abschnitt 4.1.2). Dafür schreiben wir den Integral-Kern der wechselwirkenden Theorie in der Hartree-Fock-Näherung (4.62) in führender Ordnung der Störungstheorie

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar} \left\{ -i\hbar\omega_m + E_{\text{kin}}^*(\mathbf{p}) + V^*(\mathbf{X}) - \hat{\mu}^* \right\} = & \frac{1}{\hbar} \left\{ -i\hbar\omega_m + \frac{\mathbf{p}^2}{2M} + V(\mathbf{X}) - \hat{\mu} \right\} - \Sigma^{(\text{D})}(\mathbf{p}, \omega_m; \mathbf{X}) \\ & - \Sigma^{(\text{A})}(\mathbf{p}, \omega_m; \mathbf{X}) \quad (4.133) \end{aligned}$$

mit dem direkten und dem Austausch-Term der Selbstenergie (4.110) und (4.111). Dabei verwenden wir die renormierte kinetische $E_{\text{kin}}^*(\mathbf{p})$ und potentielle $V^*(\mathbf{X})$ Energie und das renormierte chemische Potential $\hat{\mu}^*$. Die beiden Selbstenergie-Ausdrücke sind erstens unabhängig von der Matsubara-Frequenz ω_m und zweitens reell, wie man unmittelbar aus (4.110) und (4.111) sieht. Damit ändert sich der imaginäre Anteil des Integralkerns in der Hartree-Fock-Näherung nicht. Das chemische Potential erfährt in Anwesenheit der Selbstenergie eine Verschiebung um eine konstante Größe und wird zum renormierten chemischen Potential

$$\hat{\mu}^* = \hat{\mu} + \hbar \Sigma^{(D)}(\mathbf{0}, 0; \mathbf{0}) + \hbar \Sigma^{(A)}(\mathbf{0}, 0; \mathbf{0}) \equiv \hat{\mu} - \hat{\mu}^{(D)} - \hat{\mu}^{(A)} . \quad (4.134)$$

Die beiden Wechselwirkungs-Korrektur-Terme aus (4.110) und (4.110) lassen sich mit dem Integral (4.113) in einer kurzen Form als

$$\hat{\mu}^{(D)} = -\hbar \Sigma^{(D)}(\mathbf{0}, 0; \mathbf{0}) = \frac{\mu_0 m^2}{3 \lambda^3} \zeta_{3/2}(e^{\beta \hat{\mu}}) I^{(\text{int})}\left(\frac{\omega_1}{\omega_2}, \frac{\omega_1}{\omega_3}\right) , \quad (4.135)$$

$$\hat{\mu}^{(A)} = -\hbar \Sigma^{(A)}(\mathbf{0}, 0; \mathbf{0}) = \frac{\mu_0 m^2}{3 \lambda^3} \zeta_{3/2}(e^{\beta \hat{\mu}}) I^{(\text{int})}(1, 1) \quad (4.136)$$

darstellen. Damit sind wir nun in der Lage, die Renormierung des chemischen Potentials in die Gleichung (4.132) einzubauen, indem wir den freien Parameter $\hat{\mu}$ mit Hilfe des renormierten Ausdrucks nach (4.134) darstellen. Führen wir dies störungstheoretisch bis zur ersten Ordnung durch, so erhalten wir

$$1 = \frac{N_{\mathbf{0}}^{(0)}}{N} + \left(\frac{T}{T_c^{(0)}}\right)^3 \frac{\zeta_3(e^{\beta \hat{\mu}^*})}{\zeta(3)} + \frac{3\bar{\omega}}{2\bar{\omega} N^{1/3}} \left(\frac{T}{T_c^{(0)}}\right)^2 \frac{\zeta_2(e^{\beta \hat{\mu}^*})}{\zeta^{2/3}(3)} - \frac{\mu_0 m^2 \beta}{3 \lambda^3} \left(\frac{T}{T_c^{(0)}}\right)^3 \quad (4.137)$$

$$\times \left[I^{(\text{int})}\left(\frac{\omega_1}{\omega_2}, \frac{\omega_1}{\omega_3}\right) + I^{(\text{int})}(1, 1) \right] \frac{1}{\zeta(3)} \left\{ \zeta_{1/2, 3/2, 3/2}(e^{\beta \hat{\mu}^*}) - \zeta_{3/2}(e^{\beta \hat{\mu}^*}) \zeta_2(e^{\beta \hat{\mu}^*}) \right\} + \dots$$

Die restlichen Impuls- und Orts-Abhängigkeiten der Selbstenergie-Terme führen zur Renormierung des Hintergrund-Potentials (der Fallenfrequenz ω) und der kinetischen Energie (der Masse M). Die Renormierung dieser Größen würde sich aber erst ab der zweiten Ordnung der Störungstheorie und der semiklassischen Korrektur der Wechselwirkung bemerkbar machen, so dass wir sie in unseren weiteren Untersuchungen nicht berücksichtigen werden.

An dieser Stelle wollen wir noch das Kriterium für den kritischen Punkt finden und verweisen dabei auf die Analogie zur Diskussion im Abschnitt 4.3.1. Darin haben wir nämlich festgestellt, dass der Propagator unterhalb des kritischen Punktes die Divergenz im Grundzustand besitzt oder, äquivalent dazu, dass der Integralkern verschwindet, siehe Gl. (4.101). Eine ähnliche Situation liegt auch im wechselwirkenden Fall vor mit dem Unterschied, dass nun der volle Integralkern der wechselwirkender Theorie unterhalb der kritischen Temperatur verschwinden muss. In dem Ausdruck (4.133) müsste dazu das renormierte chemische Potential $\hat{\mu}^*$ entsprechend der Beziehung (4.102) dem Minimum der potentialen Energie sowie demjenigen der kinetischen Energie gleichen. Da die Ausdrücke (4.110) und (4.111) nur sanfte \mathbf{p} - und \mathbf{X} -Abhängigkeiten besitzen, behalten die beiden Energiearten zumindest für schwache Wechselwirkungen näherungsweise ihre Struktur. Somit hat das Hintergrund-Potential sein Minimum immer noch am Ursprung $\mathbf{X} = \mathbf{0}$ und auch

der kinetische Energie-Term bei verschwindenden Impulsen $\mathbf{p} = \mathbf{0}$. Dadurch ist gesichert, dass das renormierte chemische Potential in der kondensierten Phase verschwindet, d.h. es gilt $\hat{\mu}^* = 0$. Der kritische Punkt wird zusätzlich durch die Forderung charakterisiert, dass die Kondensat-Fraktion an diesem Punkt noch mikroskopisch ist. Somit können wir im thermodynamischen Limes den Beitrag des Grundzustandes $N_0^{(0)}/N$ aus (4.137) vernachlässigen und erhalten

$$1 = \left(\frac{T_c}{T_c^{(0)}} \right)^3 + \frac{3\bar{\omega}}{2\tilde{\omega}N^{1/3}} \left(\frac{T_c}{T_c^{(0)}} \right)^2 \frac{\zeta(2)}{\zeta^{2/3}(3)} - c_\delta \frac{\mu_0 m^2 \beta_c}{3\lambda_c^3} \left(\frac{T_c}{T_c^{(0)}} \right)^3 \left[I^{(\text{int})} \left(\frac{\omega_1}{\omega_2}, \frac{\omega_1}{\omega_3} \right) + I^{(\text{int})}(1, 1) \right], \quad (4.138)$$

wobei wir hier noch die in [46] eingeführte Abkürzung

$$c_\delta \equiv \frac{4}{3\zeta(3)} \left\{ \zeta \left(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right) - \zeta \left(\frac{3}{2} \right) \zeta(2) \right\} \quad (4.139)$$

mit der erweiterten Riemannschen Zeta-Funktion

$$\zeta(a, b, c) \equiv \sum_{n, n'=1}^{\infty} \frac{1}{n'^a n^b (n+n')^c} \quad (4.140)$$

verwenden. Aus der Beziehung (4.138) lassen sich nun die Verschiebungen der kritischen Temperatur berechnen. Die Resultate spezifizieren wir dabei zuerst auf die wichtigsten Extremalfälle aus (4.119) mit Dipolmomenten, die wie in Abb. 4.2 entlang der Symmetrieachsen des Fallen-Potentials ausgerichtet sind. In den jeweiligen Konfigurationen $j = 1, 2, 3$ erhalten wir dann mit Hilfe (4.124) die Resultate [47]

$$\begin{aligned} \left(\frac{\Delta T_c}{T_c^{(0)}} \right)^{(1)} &= -\frac{\zeta(2)\bar{\omega}}{2\zeta^{2/3}(3)\tilde{\omega}N^{1/3}} - c_\delta \frac{a}{\lambda_c^{(0)}} + \frac{c_\delta}{2} \frac{\mu_0 m^2 M}{12\pi\hbar^2 \lambda_c^{(0)}} f \left(\frac{\omega_1}{\omega_2}, \frac{\omega_1}{\omega_3} \right), \\ \left(\frac{\Delta T_c}{T_c^{(0)}} \right)^{(2)} &= -\frac{\zeta(2)\bar{\omega}}{2\zeta^{2/3}(3)\tilde{\omega}N^{1/3}} - c_\delta \frac{a}{\lambda_c^{(0)}} + \frac{c_\delta}{2} \frac{\mu_0 m^2 M}{12\pi\hbar^2 \lambda_c^{(0)}} f \left(\frac{\omega_2}{\omega_3}, \frac{\omega_2}{\omega_1} \right), \\ \left(\frac{\Delta T_c}{T_c^{(0)}} \right)^{(3)} &= -\frac{\zeta(2)\bar{\omega}}{2\zeta^{2/3}(3)\tilde{\omega}N^{1/3}} - c_\delta \frac{a}{\lambda_c^{(0)}} + \frac{c_\delta}{2} \frac{\mu_0 m^2 M}{12\pi\hbar^2 \lambda_c^{(0)}} f \left(\frac{\omega_3}{\omega_1}, \frac{\omega_3}{\omega_2} \right). \end{aligned} \quad (4.141)$$

Dabei erinnern wir uns an die relative Stärke des Anteils der anisotropen Wechselwirkung ϵ_{DD} aus (4.91) und nutzten für die beiden letzten Resultate die allgemeinen Beziehungen (4.120) aus. Diese Ergebnisse spiegeln für den Fall ohne Dipol-Wechselwirkung ($m = 0$) die aus Literatur bekannten Resultate wider [65,143,147] und können als Verallgemeinerungen für den Fall mit nicht verschwindenden Dipolmomenten m gesehen werden.

Zum Abschluss dieses Unterabschnitts diskutieren wir noch den Anwendungsbereich unserer störungstheoretischen Resultate der kritischen Temperatur (4.141). Natürlich stellen diese Ergebnisse nur eine Näherung führender Ordnung zu der an sich selbstkonsistenten Hartree-Fock-Molekularfeld-Näherung dar. Dennoch ist es eine bekannte Tatsache, dass eine solche Molekularfeld-Näherung ohnehin alle Fluktuationen unterschätzt und somit in der Nähe des kritischen Punktes nicht gültig ist. Nach einem Dimensions-Argument ergibt sich ein so genannter Ginzburg-Bereich

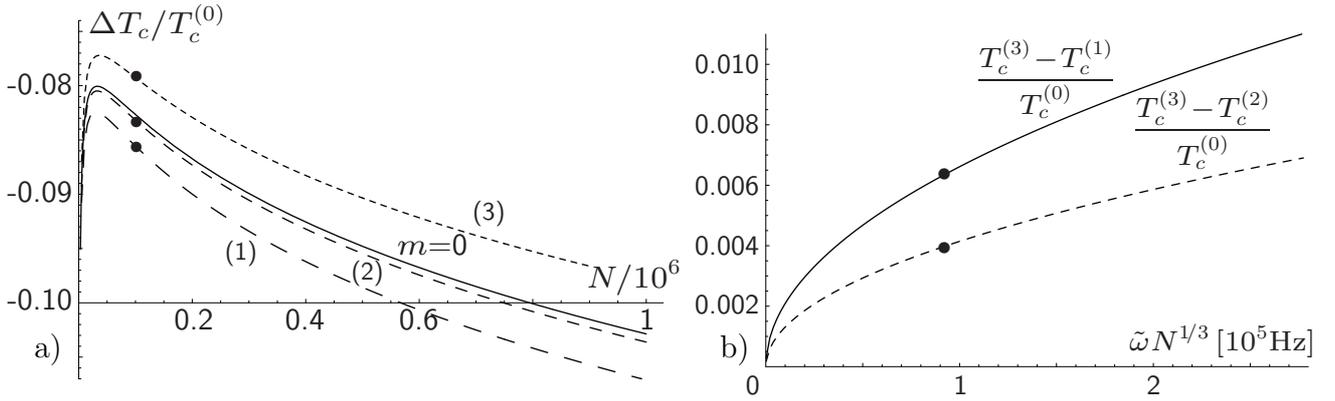


Abbildung 4.4: a) Abhängigkeit der relativen Abweichungen der kritischen Temperatur aus (4.141) von der Teilchenzahl für die Parameter im ^{52}Cr -Experiment [16]. Durchgezogene Kurve spiegelt das Resultat ohne Dipol-Dipol-Wechselwirkung $m = 0$ wider und die gestrichelten mit $m = 6m_B$ für Konfigurationen (1), (2) und (3) aus Abb. 4.2. b) Relative Temperaturdifferenzen zwischen den verschiedenen Konfigurationen in Abhängigkeit der Teilchenzahl N und der mittleren Frequenz $\tilde{\omega}$ für Parameter aus a). Schwarze Punkte stehen für die im Experiment vorliegenden N - und $\tilde{\omega}$ -Werte. Beide Abbildungen entstammen der Arbeit [47].

um die kritische Temperatur, in dem die Fluktuationen dominieren, und dieser skaliert im dreidimensionalen Raum mit der zweiten Potenz der Wechselwirkungs-Stärke [48]. Das bedeutet, alle in der selbstkonsistenten Molekularfeld-Näherung ausgerechneten Abweichungen der kritischen Temperatur ab der zweiten störungstheoretischen Ordnung sollten aufgrund der Wechselwirkungs-Korrelationen korrigiert werden [65]. Dazu müssten Beiträge jenseits der Hartree-Fock-Approximation von der in (4.58) dargestellten Art in die Molekularfeld-Näherung einbezogen werden. Andererseits bedeutet diese Aussage aber auch, dass die Korrekturen der kritischen Temperatur in der ersten störungstheoretischen Ordnung (4.141) durch die starken kritischen Fluktuationen unbeeinflusst bleiben. Mit unseren Näherungen bleiben wir somit auch am kritischen Punkt noch im sicheren Bereich.

4.3.4 Diskussion der Resultate

Nach der Herleitung der kritischen Temperatur für Kontakt- und Dipol-Dipol-wechselwirkende Systeme im letzten Unterabschnitt diskutieren wir hier die Resultate am Beispiel des verdünnten Gases aus ^{52}Cr -Atomen. Weiterhin erörtern wir ausgehend von den Gleichungen (4.141) die Möglichkeiten zur Verstärkung der charakteristischen dipolaren Effekte.

Zur Veranschaulichung des Hauptergebnisses aus dem letzten Unterabschnitt (4.141) stellen wir die Korrekturen der kritischen Temperatur in allen drei extremalen Konfigurationen in Abb. 4.4 a) in Abhängigkeit der Teilchenzahl N graphisch dar. Diese N -Abhängigkeit resultiert einerseits aus dem ersten semiklassischen Korrekturterm mit seinem dominanten Effekt bei kleinen Teilchenzahlen. Andererseits skalieren die thermischen Wellenlängen λ_c aus (4.70) mit der Teilchenzahl als $\lambda_c \sim N^{1/6}$ und dominieren den Bereich großer Teilchenzahlen N . Die konkreten Werte der

Streuwellenlänge von etwa $a = 105 a_B$ mit dem Bohrschen Radius a_B , der Masse $M = 52$ a.e., der magnetischen Dipolmomente $m = 6 m_B$ und der Frequenzen $\omega_1 = 2\pi \cdot 581$ Hz, $\omega_2 = 2\pi \cdot 406$ Hz, $\omega_3 = 2\pi \cdot 138$ Hz wurden aus dem ^{52}Cr -Experiment von Griesmaier u.a. entnommen [16]. Zum Vergleich beträgt der Wert der idealen kritischen Temperatur (2.134) in der besagten Versuchsanordnung mit $N = 10^5$ Teilchen etwa $T_c = 670$ nK. Die relative Abweichung der kritischen Temperatur aufgrund des Finite-Size-Effekts liegt in etwa bei -1.8 % und die aufgrund der Delta-Wechselwirkung bei -6.4 %. Die spezifischen Effekte der Dipol-Wechselwirkung belaufen sich bei den Werten von $f(\omega_1/\omega_2, \omega_1/\omega_3) = -0.625$ für die erste, $f(\omega_2/\omega_3, \omega_2/\omega_1) = -0.110$ für die zweite und $f(\omega_3/\omega_1, \omega_3/\omega_2) = +0.735$ für die dritte Konfiguration jeweils auf -0.29 %, -0.05 % und +0.34 %. Diese Resultate sind in Abb. 4.4 a) durch die schwarzen Punkte verdeutlicht. Sie spiegeln unsere qualitativen Vermutungen am Anfang des Abschnitts 4.3 wider. Darin stellten wir fest, dass für die erste Konfiguration aus Abb. 4.2 die Dipol-Wechselwirkung eher abstoßend wirkt und den Kondensationspunkt zu niedrigen Temperaturen verschiebt. Für die dritte Konfiguration sollte demnach genau das Gegenteil eintreten. Mit diesen Vermutungen lagen wir nun in der Tat richtig, die qualitativ unentscheidbare Situation bei der zweiten Konfiguration erwies sich nun auch quantitativ als grenzwertig mit nur einer minimalen dipolaren Netto-Abweichung. Insgesamt scheinen die dipolaren Effekte für Chrom-Atome relativ schwach zu sein und, wie man aus Abb. 4.4 a) erkennt, ändern sie sich selbst bei einer Verzehnfachung der Teilchenzahl nur marginal. Welche Ansatzpunkte es gibt, einen messbaren Effekt der Dipol-Wechselwirkung auf die kritische Temperatur festzustellen, wird im Folgenden noch erörtert.

Es fällt bei einer genaueren Betrachtung der Ergebnisse (4.141) auf, dass sowohl die semiklassische Finite-Size-Korrektur der kritischen Temperatur als auch der Effekt der Delta-Wechselwirkung Konfigurations-unabhängig sind. Die Resultate unterschieden sich bei verschiedenen Konfigurationen allein durch die Beiträge der anisotropen Dipol-Wechselwirkung. Diese Tatsache kann nun dazu verwendet werden, die klare Signatur der Dipol-Wechselwirkung anhand der Differenz-Messung der kritischen Temperatur zwischen den verschiedenen Einstellungen herauszulösen. Unsere ersten Abschätzungen dieser Differenzen sind in Abb. 4.4 b) zusammengestellt. Darin sind sie in Abhängigkeit eines Parameters dargestellt, welcher nach der Beziehung $\tilde{\omega} N^{1/3} = k_B T_c^{(0)} \zeta^{1/3}(3)/\hbar$ proportional zur kritischen Temperatur und somit auch zur mittleren Teilchendichte im thermischen Gas in der Falle ist. Wie man aus Abb. 4.4 b) und den darin eingetragenen schwarzen Punkten sieht, beträgt die Temperaturdifferenz zwischen den beiden extremalen Konfigurationen (1) und (3) derzeit 0.61 % der kritischen Temperatur $T_c^{(0)}$ des idealen Gases. Diese Differenz skaliert mit dem obigen Parameter als $(\tilde{\omega} N^{1/3})^{1/2}$, so dass seine Verdopplung den dipolaren Effekt auf einen knappen Prozent vergrößern würde. Eine weitere Vergrößerung der Dichte kann allerdings ab einem gewissen Punkt durch Drei-Körper-Verlustprozesse limitiert werden.

Eine weitere Möglichkeit zur Verstärkung der dipolaren Effekte bietet sich durch die Variation der Fallen-Anisotropie an. Diese geht nämlich in den Anisotropie-Faktor $f(\kappa, \eta)$ aus (4.141) ein, der mit (4.125) bzw. (4.126) angegeben und in Abb. 4.3 a) graphisch dargestellt ist. Gehen wir nun von der Teilchenzahl $N = 10^5$ und der mittleren Frequenz $\tilde{\omega} = 2\pi \cdot 319$ Hz aus, die in der experimentellen Realisierung mit ^{52}Cr -Atomen derzeit vorliegen. Wie würden sich die Differenzen der kritischen Temperaturen ändern, wenn man lediglich die jeweiligen Frequenz-Verhältnisse

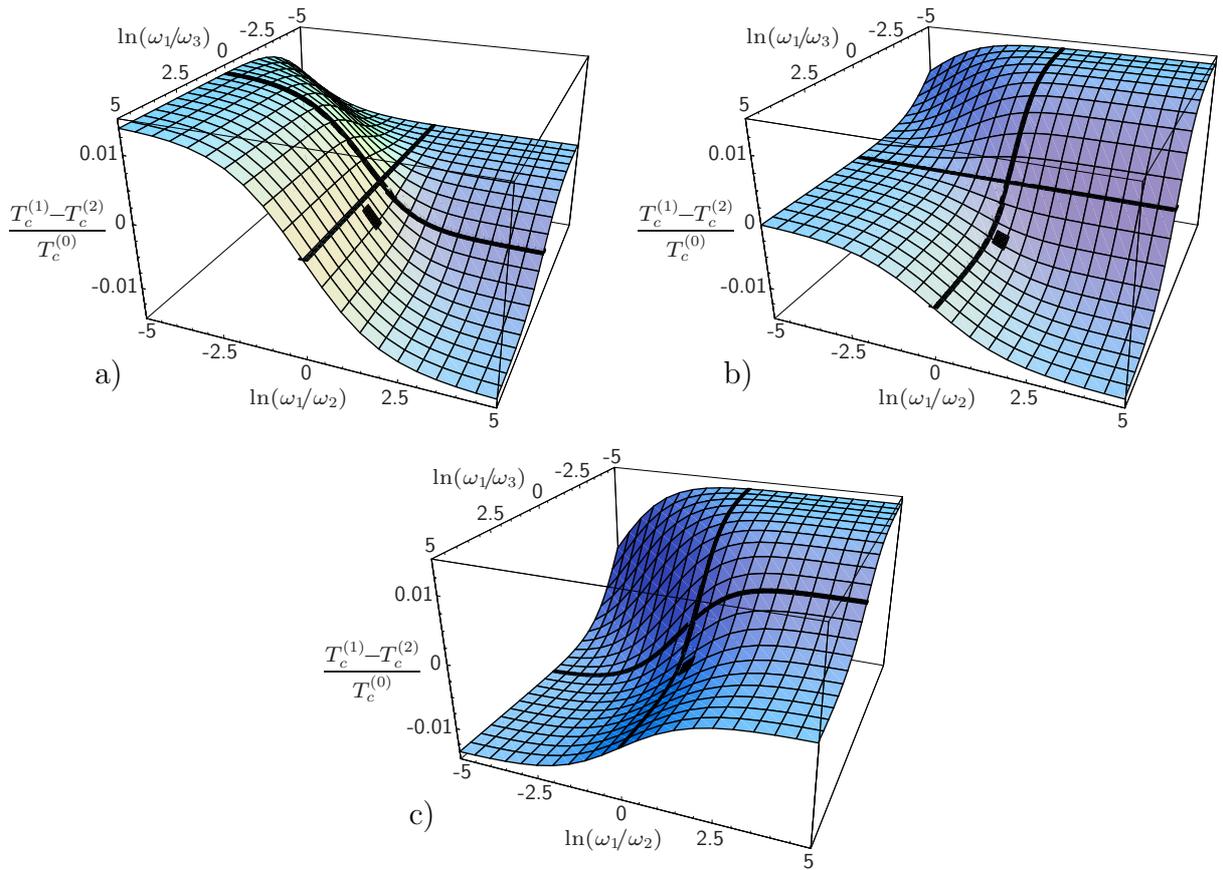


Abbildung 4.5: Relative Differenzen der kritischen Temperaturen in Konfigurationen (1), (2) und (3) aus Abb. 4.2 für die festen Teilchenzahlen $N = 10^5$ und mittleren Frequenzen $\tilde{\omega} = 2\pi \cdot 319$ Hz wie im ^{52}Cr -Experiment [16]. Alle Darstellungen sind in Abhängigkeit der beiden Anisotropie-Koeffizienten ω_1/ω_2 und ω_1/ω_3 in logarithmischer Skalierung. Schwarze Linien markieren zylindersymmetrische Konfigurationen, so dass an ihrem Kreuzungspunkt die Kugel-Symmetrie vorliegt. Die schwarzen Rauten repräsentieren die im Experiment realisierten Einstellungen. Alle Abbildungen wurden aus Ref. [47] entnommen.

verschieben würde? Die Antwort auf diese Frage ist in Abb. 4.5 zu sehen. Bei den in der experimentellen Anordnung bestehenden Anisotropien ist die Differenz der kritischen Temperaturen $T_c^{(1)} - T_c^{(3)}$ in der Tat noch am größten, aber auch sie ist noch weit vom optimalen Bereich entfernt. Das sieht man an den schwarz hervorgehobenen Rauten in jeweiligen Bildern, die in etwa die tatsächlichen Verhältnisse im Chrom-Experiment darstellen. Aus Abb. 4.5 b) erkennt man auch, dass zur weiteren Optimierung der Messung in erster Linie der Parameter ω_1/ω_2 noch etwas größer werden sollte. Dadurch würde sich ebenfalls die Differenz $T_c^{(1)} - T_c^{(2)}$ vergrößern, während $T_c^{(2)} - T_c^{(3)}$ eher geringer ausfallen würde. In der Tat sind Vergrößerungen für bestimmte Temperaturdifferenzen immer mit Verringerungen für die eine oder beide anderen verknüpft, weil die Anisotropie-Funktion an die zweite Beziehung (4.127) gebunden ist. Dieser Umstand stellt aber kein Problem dar, denn es geht darum, wenigstens eine der Differenzen zwischen zwei extremalen Einstellungen hervorzuheben. Im optimalen Bereich könnte die Temperaturdifferenz mit dem

derzeit vorliegenden Dichte-Parameter $\tilde{\omega}N^{1/3} = 9.3 \cdot 10^4$ Hz auf maximal 1.39 % der kritischen Temperatur $T_c^{(0)}$ gebracht werden, was etwas mehr als einer Verdopplung des aktuellen Wertes entspricht.

Nach der obigen Diskussion sieht man mehrere Möglichkeiten, den dipolaren Effekt auf die kritische Temperatur derart zu vergrößern, dass er für eine Messung relevant werden kann. Zum Einen ist es die Vergrößerung der Teilchendichte, zum Anderen die Optimierung der Fallen-Anisotropie. Mit beiden Effekten scheint es durchaus realistisch, den aktuellen Wert von 0.6 % auf etwa 2 % zu erhöhen. Damit kämen wir schon annähernd in den Bereich, der für die Messungen zugänglich ist. Die besten Messungen der kritischen Temperatur heutzutage wurden in der Gruppe von Aspect durchgeführt [156] und wiesen einen relativen Fehler von etwa 5 % der kritischen Temperatur des idealen Bose-Gases auf. Das ist zwar immer noch zu viel für die obigen Abschätzungen des dipolaren Effekts, man muss dabei allerdings bedenken, dass die größten Fehler systematisch sind. Dazu zählt z.B. in erster Linie die Unsicherheit der Temperatur-Kalibrierung [156]. Setzt man jedoch statt der absoluten Temperatur-Messungen auf diejenigen der Temperatur-Differenzen zwischen den verschiedenen räumlichen Konfigurationen [46,47], so dürften Kalibrierungs-Probleme auch keine Rolle spielen, weil sie alle Konfigurationen im gleichen Maß betreffen. Die restlichen statistischen Fehler liessen sich durch mehrere Wiederholungen der Experimente auf realistische 1 % senken. Die Realisierungen dieses experimentellen Vorhabens beim atomaren Chrom-Gas sind also nur die Frage der Zeit. Noch wichtiger ist aber an dieser Stelle zu bemerken, dass sich unsere Untersuchungen zur kritischen Temperatur der dipolaren Systeme keineswegs auf das Chrom-Kondensat beschränken. Wie wir bereits im Abschnitt 4.2 diskutierten, gibt es noch weitere Vertreter der dipolar-wechselwirkenden Materie, die stärkere dipolare Effekte aufweisen würden (bis Faktor 100). Zurzeit sind sie zwar noch nicht zur Kondensation gebracht worden, aber auch das ist sicherlich nur eine Frage der Zeit.

