

Kapitel 3

Ideale Bose-Gase im kanonischen Ensemble

In diesem Kapitel beschreiben wir wechselwirkungsfreie bosonische Systeme bestehend aus einer von Anfang an fest vorgegebenen Anzahl an Teilchen. Dies geschieht im Rahmen der kanonischen Ensembletheorie. Als theoretischer Unterbau dient uns hierbei der Feynmansche Pfadintegralformalismus [51,72], den wir zuerst für das Beispiel eines einzigen Teilchens einführen. Seine Verallgemeinerung auf Vielteilchen-Systeme ist unmittelbar ersichtlich, das Konzept der Ununterscheidbarkeit der Bosone muss dabei allerdings explizit berücksichtigt werden.

Die wichtigste Größe für Untersuchungen dieses Kapitels wird die kanonische N -Teilchen-Zustandssumme sein, die wir am Anfang des Abschnitts 3.1 angeben. Nach Einführung des Pfadintegral-Formalismus im Unterabschnitt 3.1.1 lässt sich die N -Teilchen-Zustandssumme im Abschnitt 3.1.2 als eine Kombination von periodischen Orbits darstellen, die sich um den so genannten Feynmanschen Imaginärzeit-Zylinder des Umfangs $\hbar\beta$ herumwinden [43]. Aufgrund der Ununterscheidbarkeit der einzelnen Teilchen ergeben sich jedoch periodische Bahnen mit nicht-trivialen Periodizitäten, die als Mehrfach-Zyklen bezeichnet werden. Sie lassen sich als korrelierte Verbände interpretieren, die zur Bose-Einstein-Kondensation führen. Da die im Unterabschnitt 3.1.2) direkt hergeleitete Formel für die N -Teilchen-Zustandssumme für konkrete Berechnungen unpraktikabel ist, muss sie noch umgeschrieben werden. Die Lösung dieses Problems wird im Unterabschnitt 3.1.3 mit Hilfe des in Ref. [73] vorgestellten Verfahrens in Form einer Rekursionsbeziehung gefunden. Darauf aufbauend, wird im Unterabschnitt 3.1.4 die Bestimmungs-Gleichung für die Grundzustand-Besetzung in einem kanonischen Ensemble angegeben. Weiterhin wird im Unterabschnitt 3.1.5 die Greens-Funktion in einem N -Teilchen-Ensemble hergeleitet.

Nach diesen theoretischen Vorbereitungen gehen wir im Abschnitt 3.2) zu Berechnungen der Wärmekapazität und der Grundzustand-Besetzung in konkreten Systemen über. Dabei beginnen wir im Unterabschnitt 3.2.1 mit dem Modell eines homogenen Gases, wie es in der Originalarbeit von Feynman studiert wurde [43]. Die direkte Auswertung zeigt jedoch ein unphysikalisches Verhalten sowohl für die Wärmekapazität als auch für den Anteil der kondensierten Teilchen. Diese Problematik wird hier durch eine leichte Modifikation des homogenen Modells behoben, die wir in der Publikation [42] vorgeschlagen haben. In anschließenden Unterabschnitten 3.2.2 und 3.2.3

behandeln wir das Problem des idealen Bose-Gases im Kastenpotential mit Dirichletschen Randbedingungen sowie in einer harmonischen Falle. Darin finden wir, dass die Wärmekapazität, die Grundzustand-Besetzung sowie die Teilchendichte sich im kanonischen Ensemble nur geringfügig von entsprechenden Ergebnissen im großkanonischen Ensemble unterscheiden, und das umso weniger, je größer die Teilchenzahl ist.

Im Anschluss daran untersuchen wir im Abschnitt 3.3 die Möglichkeit, kanonischen Resultate aus den entsprechenden großkanonischen durch die so genannte Sattelpunkts-Entwicklung zu gewinnen. Dabei stellen wir jedoch fest, dass sich dieses Vorhaben, mal abgesehen von der Berechnung in der führenden Ordnung, als nicht praktikabel herausstellt. Das zeugt von einer nicht-trivialen Verknüpfung zwischen der kanonischen und großkanonischen Ensemble-Theorie. Um diesen Eindruck noch weiter zu untermauern, diskutieren wir zum Abschluss dieses Kapitels im Abschnitt 3.4) die Teilchenzahl-Fluktuationen und die Teilchenzahl-Statistik im Grundzustand für Bose-Gase im kanonischen Ensemble. Wie am Ende des letzten Kapitels erwartet, stellen sich diese Größen im kanonischen Ensemble als physikalisch sinnvoll heraus. Damit bieten sie eine qualitative Verbesserung gegenüber den entsprechenden großkanonischen Resultaten, die man direkt aus der Bose-Einstein-Verteilung erhält.

3.1 Kanonische Beschreibung

In diesem Abschnitt stellen wir das Konzept der kanonischen Beschreibung für Vielteilchensysteme mit einer festen Teilchenzahl N vor. Unser Ziel ist es, für ein solches System die kanonische N -Teilchen-Zustandssumme

$$Z_N \equiv \text{Tr}_N e^{-\beta \hat{H}_N} . \quad (3.1)$$

zu berechnen. Dabei ist \hat{H}_N der N -Teilchen-Hamilton-Operator, der von den Orts- und Impulsoperatoren $\hat{\mathbf{x}}_i$ und $\hat{\mathbf{p}}_i$ einzelner Teilchen abhängt und speziell im wechselwirkungsfreien Fall wie

$$\hat{H}_N(\hat{\mathbf{x}}_1, \hat{\mathbf{p}}_1, \dots, \hat{\mathbf{x}}_N, \hat{\mathbf{p}}_N) = \sum_i \hat{H}(\hat{\mathbf{x}}_i, \hat{\mathbf{p}}_i) = \sum_i \left[\frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2M} + \hat{V}(\hat{\mathbf{x}}_i) \right] \quad (3.2)$$

separiert, wobei M die Masse eines einzelnen Teilchens und $\hat{V}(\hat{\mathbf{x}}_i)$ den Operator der lokalen potentiellen Energie für das i -te Teilchen darstellt. Weiterhin stellt der Ausdruck Tr_N in (3.1) die Operation der Spurbildung über die N -Teilchen-Zustände dar.

Anders als bei der zweitquantisierten feldtheoretischen Beschreibung im Abschnitt 2.1 wählen wir diesmal für die Vielteilchenzustände die erstquantisierte Version. Das heißt, wir verzichten auf die Angabe der Teilchenzahlen an jedem Ort des Raumes wie für den Zustand in (2.5). Diese Angabe wäre nämlich hier mit der Nebenbedingung der konstanten Gesamtteilchenzahl N zu vervollständigen, deren explizite Implementierung unpraktikabel für die nachfolgenden Berechnungen wäre. In der erstquantisierten Beschreibung greifen wir stattdessen z.B. auf einen N -Teilchenzustand im Ortsraum $|\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N\rangle$ zurück, bei dem sich das erste Teilchen am Ort \mathbf{x}_1 aufhält, das zweite am Ort \mathbf{x}_2 usw. Diese Zustände bilden ein vollständiges Basissystem mit der entsprechenden

Vollständigkeitsrelation im $3N$ -dimensionalen Ortsraum

$$\int d^3x_1 d^3x_2 \dots d^3x_N |\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N\rangle \langle \mathbf{x}_N, \dots, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1| = \mathbb{1}_N, \quad (3.3)$$

wobei $\mathbb{1}_N$ das Eins-Element auf dem N -Teilchen-Sektor des Fock-Raumes bedeutet. Diese Zustände können als orthonormal entsprechend der Beziehung

$$\langle \mathbf{x}'_N, \dots, \mathbf{x}'_2, \mathbf{x}'_1 | \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N \rangle = \delta(\mathbf{x}'_1 - \mathbf{x}_1) \delta(\mathbf{x}'_2 - \mathbf{x}_2) \dots \delta(\mathbf{x}'_N - \mathbf{x}_N) \quad (3.4)$$

gewählt werden.

Mit dieser Basis lässt sich die N -Teilchen-Zustandssumme (3.1) etwas konkreter als Integral

$$Z_N = \int d^3x_1 d^3x_2 \dots d^3x_N \langle \mathbf{x}_N, \dots, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1 | e^{-\beta \hat{H}_N} | \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N \rangle \quad (3.5)$$

ausschreiben. Das Matrixelement darin ist ein Spezialfall der so genannten Imaginärzeit-Amplitude

$$(\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2, \dots, \mathbf{x}'_N; \tau_b | \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N; \tau_a) \equiv \langle \mathbf{x}'_N, \dots, \mathbf{x}'_2, \mathbf{x}'_1 | e^{-\hat{H}_N(\tau_b - \tau_a)/\hbar} | \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N \rangle, \quad (3.6)$$

in der τ_a und τ_b die Imaginärzeiten des Ausgangs- bzw. Endzustandes bedeuten (das Konzept der Imaginärzeit wurde im Abschnitt 2.1 erläutert). Die Zustandssumme (3.5) wird daraus bei $\tau_a = 0$ und $\tau_b = \hbar\beta$ ausgewertet und lautet

$$Z_N(\beta) = \int d^3x_1 d^3x_2 \dots d^3x_N (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N; \hbar\beta | \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N; 0). \quad (3.7)$$

An dieser Stelle sei noch bemerkt, dass bei der obigen Beschreibung jedes Teilchen durch den Index i durchnummeriert wurde. Deswegen sichert sie noch nicht die physikalisch gegebene Ununterscheidbarkeit der einzelnen Teilchen. Diese soll sich für Bosonen in einer Symmetrie der Zustände bezüglich der Vertauschung zweier beliebiger Teilchen äußern. Im Gegensatz dazu würde eine solche Vertauschung für Fermionen ein Vorzeichenwechsel des gesamten Zustandes verursachen (Antisymmetrie). Des weiteren beschränken wir uns auf Beschreibungen bosonischer Ensembles und schreiben dafür die total symmetrisierten N -Teilchen-Ortszustände

$$|\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N\rangle^B \equiv \frac{1}{N!} \sum_P |\mathbf{x}_{P(1)}, \mathbf{x}_{P(2)}, \dots, \mathbf{x}_{P(N)}\rangle. \quad (3.8)$$

Der Index B dient darin der Unterscheidung bosonischer Zustände von denjenigen aus N klassisch unterscheidbaren Teilchen. Die Summe in (3.8) läuft über alle $N!$ Permutationen P der Zahlen $1, 2, \dots, N$ und $p(P)$ bezeichnet deren Parität. Durch die Schreibweise (3.8) wird die Symmetrie gegenüber beliebigen Vertauschungen zweier Teilchenzustände automatisch erfüllt, weil eine Vertauschung der Permutationen die Permutations-Menge selbst nicht ändert. Es sei an dieser Stelle noch erwähnt, dass die symmetrisierten Zustände (3.8) vollständig sind und der zu (3.3) analogen Vollständigkeitsrelation

$$\int d^3x_1 d^3x_2 \dots d^3x_N |\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N\rangle^B \langle \mathbf{x}_N, \dots, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1|^B = \mathbb{1}_N^B \quad (3.9)$$

genügen, wobei 1_N^B die Identität im entsprechenden Zustands-Raum darstellt.

In Analogie zur Imaginärzeit-Amplitude (3.6) lässt sich auch ihre symmetrisierte Version für bosonische Ensembles definieren. Dafür muss man lediglich als Ortszustände ihre Pendantes aus (3.8) verwenden:

$$(\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2, \dots, \mathbf{x}'_N; \tau_b | \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N; \tau_a)^B \equiv {}^B \langle \mathbf{x}'_N, \dots, \mathbf{x}'_2, \mathbf{x}'_1 | e^{-\hat{H}_N(\tau_b - \tau_a)/\hbar} | \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N \rangle^B. \quad (3.10)$$

Mit (3.8) explizit ausgeschrieben liefert das nach einer Umsortierung der Anfangsorte

$$\begin{aligned} (\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2, \dots, \mathbf{x}'_N; \tau_b | \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N; \tau_a)^B &= \frac{1}{(N!)^2} \sum_{P'} \sum_{P''} \langle \mathbf{x}'_{P''P'(N)}, \dots, \mathbf{x}'_{P''P'(2)}, \mathbf{x}'_{P''P'(1)} | \\ &\quad \times e^{-\hat{H}_N(\tau_b - \tau_a)/\hbar} | \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N \rangle. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Bemerken wir an dieser Stelle, dass das Produkt zweier Permutationen entsprechend $P''P' = P$ wiederum eine Permutation ist. Dabei reduziert sich die Doppelsumme über P' und P'' auf eine einfache P -Summe multipliziert mit der Zahl $N!$ der Permutationen über einen Dummy-Index. Damit erhalten wir mit (3.6)

$$(\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2, \dots, \mathbf{x}'_N; \tau_b | \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N; \tau_a)^B \equiv \frac{1}{N!} \sum_P (\mathbf{x}'_{P(N)}, \dots, \mathbf{x}'_{P(2)}, \mathbf{x}'_{P(1)}; \tau_b | \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N; \tau_a). \quad (3.12)$$

Weiterhin bemerken wir noch, dass beliebige Vertauschungen der Orte in den Ausgangs- und End-Zuständen die bosonische Imaginärzeit-Amplitude nicht verändert. Diese Eigenschaft lässt sich mit zwei fixierten Permutationen P_1 und P_2 als

$$\begin{aligned} (\mathbf{x}'_{P_1(1)}, \mathbf{x}'_{P_1(2)}, \dots, \mathbf{x}'_{P_1(N)}; \tau_b | \mathbf{x}_{P_2(1)}, \mathbf{x}_{P_2(2)}, \dots, \mathbf{x}_{P_2(N)}; \tau_a)^B \\ = (\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2, \dots, \mathbf{x}'_N; \tau_b | \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N; \tau_a)^B \end{aligned} \quad (3.13)$$

hinschreiben und ist mit (3.8) unmittelbar aus der Definition (3.10) einsichtig.

Um diesen Unterabschnitt abzuschließen, definieren wir noch die Zustandssumme für kanonische Ensembles aus N Bosonen. Sie ergibt sich mit der Imaginärzeit-Amplitude (3.12) in Analogie zu (3.7) als

$$Z_N^B(\beta) = \int d^3x_1 d^3x_2 \dots d^3x_N (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N; \hbar\beta | \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N; 0)^B. \quad (3.14)$$

Die Imaginärzeit-Amplitude stellt im kanonischen Formalismus ein wichtiges theoretisches Konzept dar. Daher beschäftigen wir uns mit ihr im nächsten Unterabschnitt etwas eingehender und leiten ihre Pfadintegral-Darstellung her.

3.1.1 Pfadintegral-Darstellung der Imaginärzeit-Amplitude

Das Ziel dieses Unterabschnittes ist in erster Linie die Herleitung der Pfadintegral-Darstellung für die Ein-Teilchen-Imaginärzeit-Amplitude. Das dient nicht nur einer Einführung in den Pfadintegral-Formalismus, sondern liefert auch ein dynamisches Bild für Imaginärzeit-Amplituden. Das wird

sich für spätere Untersuchungen als hilfreich erweisen. In der Herleitung halten wir uns weitestgehend an die Darstellung im Lehrbuch von Kleinert [51, Kapitel 2].

Den Ausdruck für die Imaginärzeit-Amplitude eines einzigen Teilchens erhalten wir aus der allgemeinen Form (3.6) zu

$$(\mathbf{x}', \tau_b | \mathbf{x}, \tau_a) \equiv \langle \mathbf{x}' | e^{-\hat{H}(\tau_b - \tau_a)/\hbar} | \mathbf{x} \rangle . \quad (3.15)$$

Als erstes bemerken wir, dass diese Größe die Dynamische Evolution des Anfangszustandes $|\mathbf{x}\rangle$ zum Endzustand $|\mathbf{x}'\rangle$ in der Imaginärzeit darstellt. Dies wird unmittelbar klar, wenn man das Imaginärzeit-Intervall (τ_a, τ_b) mit L Gitterplätzen in $L+1$ kleine Intervalle $\epsilon = (\tau_b - \tau_a)/(L+1)$ aufteilt und einen Gitterplatz nach dem anderen durchläuft. Die Zahl L der Imaginärzeit-Gitterplätze wird dabei so groß gewählt, dass ϵ als klein behandelt werden kann. Technisch wird die Gitterung des Imaginärzeitintervalls durch die Faktorisierung der Exponenten in (3.15) realisiert, so dass wir die Form

$$(\mathbf{x}', \tau_b | \mathbf{x}, \tau_a) = \langle \mathbf{x}' | e^{-\epsilon \hat{H}/\hbar} \underbrace{\mathbb{1}_1 e^{-\epsilon \hat{H}/\hbar} \dots \mathbb{1}_1 e^{-\epsilon \hat{H}/\hbar}}_{L \text{ Faktoren}} | \mathbf{x} \rangle \quad (3.16)$$

erhalten. Da die Hamilton-Operatoren miteinander kommutieren, ist eine solche Zerlegung eine vorerst exakte Operation. Zwischen jeweils zwei Kurzzeit-Entwicklungen kann eine Vollständigkeitsrelation der Ortszustände (3.3) eingeschoben werden, die sich für ein einziges Teilchen auf $\int d^3x |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}| = \mathbb{1}_1$ reduziert. Damit erhält man die Gitterversion der Imaginärzeit-Amplitude

$$(\mathbf{x}', \tau_b | \mathbf{x}, \tau_a) = \prod_{j=1}^L \left[\int d^3x_j \right] \langle \mathbf{x}' | e^{-\epsilon \hat{H}/\hbar} | \mathbf{x}_L \rangle \langle \mathbf{x}_L | e^{-\epsilon \hat{H}/\hbar} | \mathbf{x}_{L-1} \rangle \dots \langle \mathbf{x}_1 | e^{-\epsilon \hat{H}/\hbar} | \mathbf{x} \rangle . \quad (3.17)$$

Demnach entwickelt sich der Zustand von einem imaginärzeitlichen Gitterplatz an einem bestimmten Ausgangsort zum nächsten Gitterplatz, wo es zwar einen beliebigen Ort erreichen kann, allerdings mit einer Wahrscheinlichkeits-Amplitude, die durch die Exponential-Funktion $e^{-\epsilon \hat{H}/\hbar}$ vorgegeben wird. Genau diese Amplitude gilt es, im Folgenden zu berechnen.

Da die Ortszustände den Hamilton-Operator \hat{H} im allgemeinen nicht diagonalisieren, werden wir die Standard-Zerlegung

$$\hat{H}(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}}) = \hat{T}(\hat{\mathbf{p}}) + \hat{V}(\hat{\mathbf{x}}) \quad (3.18)$$

verwenden, wobei $\hat{T}(\hat{\mathbf{p}})$ den kinetischen Energieoperator und $\hat{V}(\hat{\mathbf{x}})$ wie in (3.2) den Operator der potentiellen Energie darstellt. Der erste hängt nur vom Impulsoperator $\hat{\mathbf{p}}$ ab. Der zweite ist eine Funktion des Ortsoperators $\hat{\mathbf{x}}$ und wird daher von allen Ortszuständen diagonalisiert. Da die beiden Energieoperatoren nicht miteinander kommutieren, stellen wir fest, dass die Kurzzeit-Entwicklungs-Amplituden nicht exakt faktorisieren. Entsprechend der Baker-Campbell-Hausdorff-Beziehung (siehe z.B. [51, Kapitel2]) gilt aber näherungsweise

$$e^{-\epsilon \hat{H}/\hbar} = e^{-\epsilon \hat{T}(\hat{\mathbf{p}})/\hbar} e^{-\epsilon \hat{V}(\hat{\mathbf{x}})/\hbar} e^{\epsilon^2 [\hat{T}(\hat{\mathbf{p}}), \hat{V}(\hat{\mathbf{x}})]/2\hbar^2 + \dots} . \quad (3.19)$$

Da jedoch ϵ als klein angenommen wurde, reicht die Näherung niedrigster Ordnung $\mathcal{O}(\epsilon^2)$ für weitere Untersuchungen bereits aus, solange die Potentiale sanft genug sind. Um nun bei Berechnung

der Kurzzeit-Übergangsamplitude weiter voranzukommen, verwenden wir noch die Vollständigkeit der Impulszustände

$$\int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} |\mathbf{p}\rangle\langle\mathbf{p}| = \mathbb{1}_1 \quad (3.20)$$

und erhalten

$$\langle\mathbf{x}_{j+1}| e^{-\epsilon\hat{H}/\hbar} |\mathbf{x}_j\rangle = \int \frac{d^3 p_j}{(2\pi\hbar)^3} \langle\mathbf{x}_{j+1}|\mathbf{p}_j\rangle\langle\mathbf{p}_j|\mathbf{x}_j\rangle e^{-\epsilon\hat{T}(\hat{\mathbf{p}})/\hbar} e^{-\epsilon\hat{V}(\hat{\mathbf{x}})/\hbar} e^{\mathcal{O}(\epsilon^2)}. \quad (3.21)$$

Hierfür gelten noch folgende Eigenwertgleichungen: $\hat{T}(\hat{\mathbf{p}})|\mathbf{p}_j\rangle = T(\mathbf{p}_j)|\mathbf{p}_j\rangle$ und $\hat{V}(\hat{\mathbf{x}})|\mathbf{x}_j\rangle = V(\mathbf{x}_j)|\mathbf{x}_j\rangle$, so dass sich die obige Identität weiter zu

$$\langle\mathbf{x}_{j+1}| e^{-\epsilon\hat{H}/\hbar} |\mathbf{x}_j\rangle = \int \frac{d^3 p_j}{(2\pi\hbar)^3} \langle\mathbf{x}_{j+1}|\mathbf{p}_j\rangle\langle\mathbf{p}_j|\mathbf{x}_j\rangle \exp\left\{-\frac{\epsilon}{\hbar} [T(\mathbf{p}_j) + V(\mathbf{x}_j) + \mathcal{O}(\epsilon)]\right\} \quad (3.22)$$

vereinfacht. Die noch übrig gebliebenen Skalarprodukte repräsentieren entsprechend der Beziehung $\langle\mathbf{p}_j|\mathbf{x}_j\rangle = e^{-i\mathbf{p}_j\mathbf{x}_j/\hbar}$ ebene Wellen. Damit ergibt sich für die Kurzzeit-Entwicklung

$$\langle\mathbf{x}_{j+1}| e^{-\epsilon\hat{H}/\hbar} |\mathbf{x}_j\rangle = \int \frac{d^3 p_j}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left\{-\frac{\epsilon}{\hbar} \left[-i\mathbf{p}_j \frac{\mathbf{x}_{j+1} - \mathbf{x}_j}{\epsilon} + T(\mathbf{p}_j) + V(\mathbf{x}_j) + \mathcal{O}(\epsilon)\right]\right\}. \quad (3.23)$$

An dieser Stelle können wir uns noch an die explizite Form der nichtrelativistischen kinetischen Energie $T(\mathbf{p}_j) = \mathbf{p}_j^2/2M$ erinnern, wie wir sie in (3.2) in Operatorform ausgeschrieben haben. Damit lässt sich die Impulsintegration in (3.23) explizit auswerten mit dem Resultat

$$\langle\mathbf{x}_{j+1}| e^{-\epsilon\hat{H}/\hbar} |\mathbf{x}_j\rangle = \left(\frac{M}{2\pi\hbar\epsilon}\right)^{3/2} \exp\left\{-\frac{\epsilon}{\hbar} \left[-\frac{M}{2} \left(\frac{\mathbf{x}_{j+1} - \mathbf{x}_j}{\epsilon}\right)^2 + V(\mathbf{x}_j) + \mathcal{O}(\epsilon)\right]\right\}. \quad (3.24)$$

Das ist bereits der Ausdruck, der die Wahrscheinlichkeits-Amplitude angibt, das Teilchen am Orte \mathbf{x}_{j+1} zu finden, falls es sich auf dem vorherigen Imaginärzeit-Gitterpunkt am Orte \mathbf{x}_j aufhielt.

Diese gerade ausgerechnete Kurzzeit-Entwicklungsamplitude setzen wir nun in den Ausdruck (3.17) ein. Aus Darstellungs-Gründen empfiehlt es sich noch, den Anfangsort \mathbf{x} explizit mit \mathbf{x}_0 und den Endort \mathbf{x}' mit \mathbf{x}_{L+1} zu identifizieren. Dafür schreiben wir (3.17) als Produkt von $L+2$ Integralen:

$$\begin{aligned} (\mathbf{x}', \tau_b | \mathbf{x}, \tau_a) &= \prod_{j=1}^L \left[\int \frac{d^3 x_j}{\sqrt{2\pi\hbar\epsilon/M}} \right] \int \frac{d^3 x_0 d^3 x_{L+1}}{\sqrt{2\pi\hbar\epsilon/M}} \delta(\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}) \delta(\mathbf{x}_{L+1} - \mathbf{x}') \\ &\quad \times \exp\left\{-\frac{\epsilon}{\hbar} \sum_{j=0}^L \left[\frac{M}{2} \left(\frac{\mathbf{x}_{j+1} - \mathbf{x}_j}{\epsilon}\right)^2 + V(\mathbf{x}_j) + \mathcal{O}(\epsilon)\right]\right\}. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Das ist die gesuchte gegitterte Form der Imaginärzeit-Entwicklungs-Amplitude (3.15). Der Kontinuums-Limes $\epsilon \rightarrow 0$ bzw. $L \rightarrow \infty$ lässt sich sofort durchführen, indem man die Ersetzung

$\mathbf{x}_j \mapsto \mathbf{x}(\tau)$ vornimmt und die Randpunkte als $\mathbf{x}_0 \mapsto \mathbf{x}(\tau_a)$ und $\mathbf{x}_{L+1} \mapsto \mathbf{x}(\tau_b)$ bezeichnet. Der Differenzen-Quotient im Exponenten von (3.25) muss dann durch die zeitliche Ableitung

$$\frac{\mathbf{x}_{j+1} - \mathbf{x}_j}{\epsilon} \mapsto \frac{\partial \mathbf{x}(\tau)}{\partial \tau} \equiv \dot{\mathbf{x}}(\tau) \quad (3.26)$$

und die Summe über die Imaginärzeit-Gitterplätze durch das Integral

$$\epsilon \sum_{j=0}^L \mapsto \int_{\tau_a}^{\tau_b} d\tau \quad (3.27)$$

ersetzt werden. Das Produkt über die Raumintegrationen für jeden Gitterplatz in (3.25) wird im Kontinuumlimes außerdem noch durch das so genannte Pfadintegral

$$\prod_{j=1}^L \left[\int \frac{d^3 x_j}{\sqrt{2\pi\hbar\epsilon/M}} \right] \int \frac{d^3 x_0 d^3 x_{L+1}}{\sqrt{2\pi\hbar\epsilon/M}} \delta(\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}) \delta(\mathbf{x}_{L+1} - \mathbf{x}') \mapsto \int_{\mathbf{x}(\tau_a)=\mathbf{x}}^{\mathbf{x}(\tau_b)=\mathbf{x}'} \mathcal{D}^3 x(\tau) \quad (3.28)$$

dargestellt. Fassen wir nun (3.26)–(3.28) zusammen und vernachlässigen Terme der höheren Ordnung $\epsilon\mathcal{O}(\epsilon)$ im Exponenten von (3.25), so erhalten wir die kontinuierliche Pfadintegral-Darstellung der Imaginärzeit-Amplitude

$$(\mathbf{x}', \tau_b | \mathbf{x}, \tau_a) = \int_{\mathbf{x}(\tau_a)=\mathbf{x}}^{\mathbf{x}(\tau_b)=\mathbf{x}'} \mathcal{D}^3 x(\tau) e^{-\mathcal{A}[\mathbf{x}]/\hbar}, \quad (3.29)$$

wobei wir mit \mathcal{A} die Euklidische Wirkung im Konfigurationsraum

$$\mathcal{A}[\mathbf{x}] \equiv \int_{\tau_a}^{\tau_b} d\tau \left[\frac{M}{2} \dot{\mathbf{x}}^2(\tau) + V(\mathbf{x}(\tau)) \right] \quad (3.30)$$

bezeichnet haben. Zu bemerken ist an dieser Stelle, dass die obige Argumentation nur für genügend sanfte Potentiale $V(x)$ möglich ist. Ein Coulomb-Potential $\sim 1/|\mathbf{x}|$ gehört beispielsweise nicht dazu und muss anders behandelt werden [51, Kapitel 12]. Für unsere weitere Untersuchungen werden derartige Probleme aber keine Rolle spielen.

Nun kommen wir zu den Eigenschaften der Ein-Teilchen-Imaginärzeit-Amplitude, die auch für spätere Berechnungen wichtig sind. Dazu zählt in erster Linie die so genannte Semigruppen-Eigenschaft, die der so genannten Chapman-Kolmogorov-Eigenschaft der Statistik entspricht. Diese erhalten wir, indem wir z.B. Zerlegung (3.17) mit nur einem Gitterpunkt ($L = 1$) verwenden, den wir allerdings an einem beliebigen Imaginärzeit-Punkt legen (die Äquidistanz der Imaginärzeit-Gitterung war in der obigen Rechnung nicht entscheidend, sondern nur buchhalterisch bequemer). Das ergibt also

$$\begin{aligned} (\mathbf{x}', \tau_b | \mathbf{x}, \tau_a) &= \int d^3 x'' \langle \mathbf{x}' | e^{-(\tau_b - \tau_c)\hat{H}/\hbar} | \mathbf{x}'' \rangle \langle \mathbf{x}'' | e^{-(\tau_c - \tau_a)\hat{H}/\hbar} | \mathbf{x} \rangle \\ &= \int d^3 x'' (\mathbf{x}', \tau_b | \mathbf{x}'', \tau_c) (\mathbf{x}'', \tau_c | \mathbf{x}, \tau_a). \end{aligned} \quad (3.31)$$

Die weitere Eigenschaft hat mit der Unabhängigkeit des Hamilton-Operators von der Imaginärzeit zu tun und damit, dass in der Formel (3.15) nur die Differenz der Imaginärzeiten vorkommt. Daraus resultiert die Translations-Invarianz der Imaginärzeit-Amplitude

$$(\mathbf{x}', \tau_b | \mathbf{x}, \tau_a) = (\mathbf{x}', \tau_b + \tau | \mathbf{x}, \tau_a + \tau) \quad (3.32)$$

mit einer beliebigen Imaginärzeit-Verschiebung τ .

Um das Problem der Ein-Teilchen-Imaginärzeit-Amplitude abzuschließen, geben wir noch an dieser Stelle seine Spektral-Darstellung an. Dafür verwenden wir die Energie-Eigenzustände $|\mathbf{k}\rangle$, welche die Ein-Teilchen-Schrödingergleichung

$$\hat{H}(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}}) |\mathbf{k}\rangle = E_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}\rangle \quad (3.33)$$

lösen. Diese Zustände erfüllen dann die Vollständigkeitsrelation $\sum_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}| = \mathbb{1}_1$ und können als zueinander orthonormal gewählt werden entsprechend der Beziehung $\langle \mathbf{k}' | \mathbf{k} \rangle = \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}}$. Damit ergibt sich nach (3.15)

$$(\mathbf{x}', \tau_b | \mathbf{x}, \tau_a) \equiv \sum_{\mathbf{k}} \langle \mathbf{x}' | \mathbf{k} \rangle e^{-E_{\mathbf{k}}(\tau_b - \tau_a)/\hbar} \langle \mathbf{k} | \mathbf{x} \rangle \equiv \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}') e^{-E_{\mathbf{k}}(\tau_b - \tau_a)/\hbar} \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}) , \quad (3.34)$$

wobei die Projektion des Energiezustandes auf den Ortszustand entsprechend der Gleichung $\langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle \equiv \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ die Wellenfunktion liefert. Letztere haben wir bereits am Anfang des Abschnitts 2.1.2 eingeführt.

Der oben behandelte Spezialfall eines einzigen Teilchens kann noch auf N -Teilchen-Zustände problemlos verallgemeinert werden. So ergibt sich für die N -Teilchen-Imaginärzeit-Amplitude (3.6) mit dem Hamilton-Operator (3.2) in völliger Analogie zum oben behandelten Ein-Teilchen-Fall die seine Pfadintegral-Darstellung

$$(\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2, \dots, \mathbf{x}'_N; \tau_b | \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N; \tau_a) = \prod_{n=1}^N \left[\int_{\mathbf{x}_n(\tau_a) = \mathbf{x}_n}^{\mathbf{x}_n(\tau_b) = \mathbf{x}'_n} \mathcal{D}^3 x_n(\tau) \right] e^{-\mathcal{A}_N[\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N]/\hbar} . \quad (3.35)$$

Die darin vorkommenden N -Teilchen-Pfadkonfigurationen werden durch die Euklidische N -Teilchen-Wirkung gewichtet, die sich im wechselwirkungsfreien Fall rein additiv aus den Wirkungen (3.30) für einzelne Teilchen zusammensetzt:

$$\mathcal{A}_N[\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N] \equiv \sum_{n=1}^N \int_{\tau_a}^{\tau_b} d\tau \left[\frac{M}{2} \dot{\mathbf{x}}_n^2(\tau) + V(\mathbf{x}_n(\tau)) \right] . \quad (3.36)$$

Dies ist eine Folge der Separation des wechselwirkungsfreien Hamilton-Operators (3.2). Unmittelbar daraus folgt die Faktorisierungs-Eigenschaft der N -Teilchen-Imaginärzeit-Amplitude in N einzelne Amplituden (3.29)

$$(\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2, \dots, \mathbf{x}'_N; \tau_b | \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N; \tau_a) = (\mathbf{x}'_1; \tau_b | \mathbf{x}_1; \tau_a) (\mathbf{x}'_2; \tau_b | \mathbf{x}_2; \tau_a) \dots (\mathbf{x}'_N; \tau_b | \mathbf{x}_N; \tau_a) . \quad (3.37)$$

Ausgehend von diesem Resultat sind wir in der Lage, die kanonische N -Teilchen-Zustandssumme nach der Gleichung (3.14) herzuleiten. Genau dieser Aufgabe widmen wir uns im nächsten Unterabschnitt.

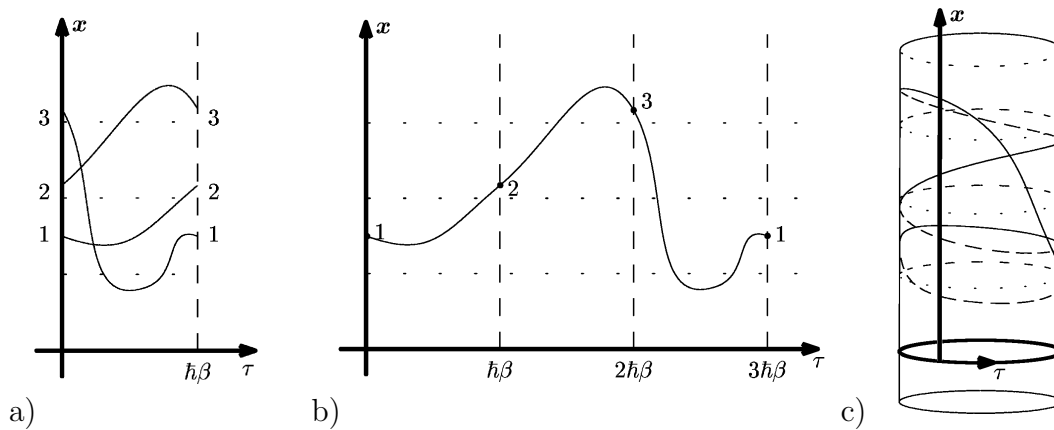


Abbildung 3.1: Verlauf der drei Teilchenpfade a) in der normalen Darstellung innerhalb einer Periode, b) in periodisch fortgesetzter Darstellung und c) aufgewickelt auf einem Imaginärzeit-Zylinder mit Kreisumfang $\hbar\beta$.

3.1.2 Kanonische Zustandssumme

In diesem Abschnitt berechnen wir die Zustandssumme in einem Ensemble aus N Bosonen. Obwohl für die Zustandssumme nur die geschlossenen periodischen Pfade berücksichtigt werden, verursacht die Ununterscheidbarkeit der betreffenden Teilchen kompliziertere Pfadkonfigurationen, welche sich dennoch zu einem geschlossenen Ausdruck für die N -Teilchen-Zustandssumme kombinieren lassen. Das zeigen wir in der anschließenden Diskussion, in der wir uns an die grobe Struktur der Darstellung im Feinmans Textbuch [43] orientieren (siehe auch [42,74]).

Als erstes berechnen wir die Zustandssumme eines Teilchens, die sich als Spezialfall der Gleichung (3.7) zu

$$Z_1(\beta) = \int d^3x (\mathbf{x}; \hbar\beta | \mathbf{x}; 0) \quad (3.38)$$

ergibt. Dieses Resultat hätten wir natürlich auch aus der Gleichung (3.14) entnehmen können, da es bei einem einzigen Teilchen egal ist, ob es ein Boson, Fermion oder gar ein klassisch unterscheidbares Teilchen ist, erübrigt sich auch die Unterscheidung zwischen diesen verschiedenen Möglichkeiten. Damit wird weiterhin der entsprechende Index B unterdrückt. Nun schreiten wir fort, indem wir uns an die Spektral-Darstellung der Ein-Teilchen-Imaginärzeit-Amplitude (3.34) erinnern. Die Ortsintegration in (3.38) führt dann aufgrund der Orthonormalitäts-Beziehung (2.37) zum folgenden Resultat:

$$Z_1(\beta) = \sum_{\mathbf{k}} e^{-\beta E_{\mathbf{k}}} . \quad (3.39)$$

Eine Verallgemeinerung der Zustandssumme auf N klassische unterscheidbare Teilchen ist unmittelbar einsichtig und liefert nach (3.7) mit der Faktorisierungs-Eigenschaft (3.37) das klassische

Resultat

$$Z_N(\beta) = \int d^3x_1 d^3x_2 \dots d^3x_N (\mathbf{x}_1; \hbar\beta | \mathbf{x}_1; 0) (\mathbf{x}_2; \hbar\beta | \mathbf{x}_2; 0) \dots (\mathbf{x}_N; \hbar\beta | \mathbf{x}_N; 0) = Z_1^N(\beta) . \quad (3.40)$$

Ganz anders ist es, wenn die Teilchen identisch sind. Für sie ergibt sich aus (3.14) mit (3.12) lediglich eine kompliziertere Integral-Darstellung, die wir nach Faktorisierung (3.37) zu

$$Z_N^B(\beta) = \frac{1}{N!} \sum_P \int d^3x_1 d^3x_2 \dots d^3x_N (\mathbf{x}_{P(1)}; \hbar\beta | \mathbf{x}_1; 0) (\mathbf{x}_{P(2)}; \hbar\beta | \mathbf{x}_2; 0) \dots (\mathbf{x}_{P(N)}; \hbar\beta | \mathbf{x}_N; 0) \quad (3.41)$$

erhalten. Die Auswertung dieser Größe ist keineswegs trivial und bedarf noch weiterer Ausführungen. Obwohl uns für die Zustandssumme lediglich periodische N -Teilchen-Pfade interessieren, sind die einzelnen Perioden nur für die triviale identische Permutation so einfach wie in (3.40). Im allgemeinen sind die Zyklen verschieden lang und variieren je nach Permutation P . Dieser Umstand kann mit Abb. 3.1 verdeutlicht werden. Dort ist der Pfad eines Teilchens abgebildet, der zur Zeit $\tau = \hbar\beta$ nicht an seinem Startpunkt landet, sondern an dem Startpunkt eines zweiten Teilchens. Das zweite Teilchen landet am Startpunkt des dritten, und das dritte landet am Startpunkt des ersten. Aufgrund der Ununterscheidbarkeit einzelner Teilchen ist die Drei-Teilchen-Konfiguration zur Imaginärzeit $\tau = \hbar\beta$ physikalisch gesehen dieselbe wie die zu $\tau = 0$ und muss für die Zustandssumme mitberücksichtigt werden. Interessanterweise entspricht eine solche Konfiguration einem einzelnen periodischen Pfad mit der dreifachen Periode, der in Abb. 3.1 b) angedeutet ist. In Abb. c) ist derselbe Pfad auf dem Feynmanschen Imaginärzeit-Zylinder als ein dreifacher Zyklus abgebildet. Im allgemeinen lässt sich der Beitrag eines geschlossenen Zyklus der Länge n zur N -Teilchen-Zustandssumme (3.41) in der Form

$$h_n(\beta) \equiv \int d^3x_1 d^3x_2 \dots d^3x_n (\mathbf{x}_1; \hbar\beta | \mathbf{x}_n; 0) \dots (\mathbf{x}_3; \hbar\beta | \mathbf{x}_2; 0) (\mathbf{x}_2; \hbar\beta | \mathbf{x}_1; 0) \quad (3.42)$$

angeben. Das erste Teilchen startet dabei am Ort \mathbf{x}_1 und geht zu \mathbf{x}_2 , das zweite startet bei \mathbf{x}_2 und geht zu \mathbf{x}_3 und so weiter bis das letzte n -te Teilchen am Ort \mathbf{x}_n beginnt und am Ort \mathbf{x}_1 endet, womit sich der Zyklus nach n Perioden schließt. Sein Beitrag (3.42) kann noch mit Hilfe der Zeittranslations-Invarianz (3.32) zu

$$h_n(\beta) \equiv \int d^3x_1 d^3x_2 \dots d^3x_n (\mathbf{x}_1; n\hbar\beta | \mathbf{x}_n; (n-1)\hbar\beta) \dots (\mathbf{x}_3; 2\hbar\beta | \mathbf{x}_2; \hbar\beta) (\mathbf{x}_2; \hbar\beta | \mathbf{x}_1; 0) \quad (3.43)$$

umgeschrieben werden. Die anschließende $(n-1)$ -fache Anwendung der Gruppen-Eigenschaft (3.31) reduziert diesen Ausdruck weiterhin zu

$$h_n(\beta) = \int d^3x_1 (\mathbf{x}_1; n\hbar\beta | \mathbf{x}_1; 0) = Z_1(n\beta) . \quad (3.44)$$

Die letzte Identität folgt unmittelbar aus der Gleichung (3.38) für die Zustandssumme eines Teilchens mit der reziproken Temperatur $n\beta$. Aus der Spektral-Darstellung (3.39) ergibt sich damit

$$Z_1(n\beta) = \sum_{\mathbf{k}} e^{-\beta(nE_{\mathbf{k}})} \quad (3.45)$$

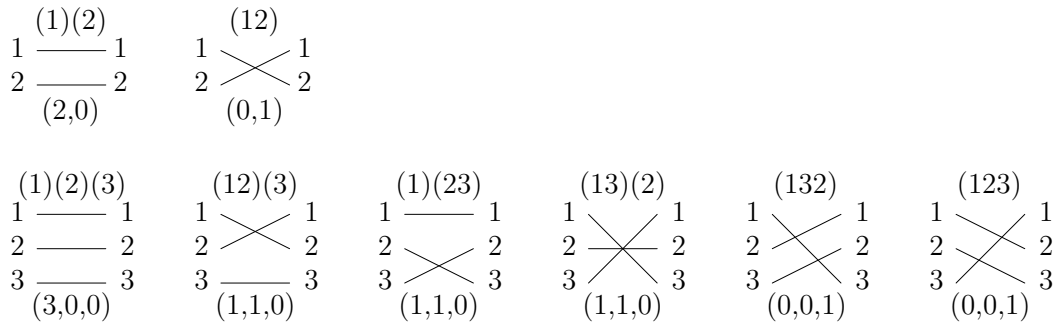


Abbildung 3.2: Darstellung aller Permutationen für zwei (obere Reihe) und drei (untere Reihe) Teilchen. Die Indizierung oberhalb jeder Permutation beschreibt diese in der Blockschreibweise. Die zweier- bzw. dreier-Tupeln darunter beschreiben die jeweiligen Permutationen in der Zykluslängen-Darstellung durch die Tupeln (C_1, C_2) bzw. (C_1, C_2, C_3) .

und wir sehen noch eine weitere Interpretations-Möglichkeit eines n -fachen Zyklus. Die Größe (3.45) entspricht nämlich der Zustandssumme eines einzigen Quasiteilchens, dessen Energie-Eigenwerte die n -fachen Energien der realen Teilchen sind. Dieses Quasiteilchen verhält sich dann wie ein korrelierter n -Teilchen-Verband. Eine Energiefluktuation kann entweder seine Energie um eine n -fache Portion eines einzelnen Teilchens verändern oder den Verband als solchen umstrukturieren (einzelne Teilchen entreißen oder hinzufügen). Die Energie-änderung nur eines der n darin befindlichen Teilchen ist aber nicht möglich.

An dieser Stelle kehren wir zurück zum ursprünglichen Problem der N -Teilchen-Zustandssumme (3.41). Nach dem oben Besagten sehen wir, dass ihre verschiedene Permutationen zu unterschiedlichen Zyklen-Zerlegungen führen, was wir in der Form

$$Z_N^B(\beta) = \frac{1}{N!} \sum_P \prod_{n=1}^{(\sum nC_n=N)} [Z_1(n,\beta)]^{C_n} \tag{3.46}$$

zusammenfassen. Dabei bedeutet C_n die Anzahl der n -Zyklen, so dass nC_n aller Teilchen in solchen n -Zyklen eingebunden sind. Die Gesamtteilchenzahl N ist damit auf alle solche Zyklen zu verteilen. Das ergibt die Nebenbedingung $\sum_n nC_n = N$ für die möglichen Zerlegungen, was mit der runden Klammer über dem Produktzeichen in (3.46) angedeutet wurde. Eine weitere Berechnung scheint zuerst aussichtslos zu sein, insbesondere wenn man bedenkt, dass die Anzahl aller zu berücksichtigenden Permutationen in einem N -Teilchen-Ensemble $N!$ beträgt und somit extrem schnell mit der Teilchenzahl anwächst. Die im Folgenden geschilderte Betrachtung schafft gerade in dieser Situation Abhilfe.

Zuerst vergegenwärtigen wir uns der Komplexität der durch die Ununterscheidbarkeit entstandenen Pfad-Strukturen anhand der Permutations-Gruppen für Ensembles aus zwei und drei Teilchen. Diese sind in Abb. 3.2 dargestellt. In einem Zwei-Teilchen-Ensemble werden sie durch $2! = 2$ verschiedene Kombinationen repräsentiert, in einem Drei-Teilchen-Ensemble schon durch $3! = 6$ solcher. Alle diese Kombinationen entsprechen den im mathematischen Sinne verschiedenen Permutationen. Sie können durch die Block-Schreibweise dargestellt werden, indem die darin vor-

kommenden abgeschlossene Zyklen in voneinander getrennten Blöcken zusammengefasst werden. In jedem einzelnen Block werden die Teilchennummern der Reihenfolge nach aufgeführt. Diese Schreibweise kann noch anhand der Beispiele aus Abb. 3.2 verdeutlicht werden, in denen sie über der jeweiligen Permutation dargestellt ist. Bei einer solchen Beschreibung wurde allerdings jedem Teilchen eine Nummer zugeordnet, und so wurde z.B. die zweite Kombination in der zweiten Reihe aus Abb. 3.2 von der dritten und vierten unterschieden. Auch die vorletzte Kombination wurde von einer anderen Permutation dargestellt als die letzte. Doch bei ununterscheidbaren Teilchen darf es auf die Teilchen-Nummerierung nicht ankommen. Physikalisch voneinander zu unterscheiden sind lediglich Permutationen, bei denen die Zykluslängen verschieden sind. So sind beispielsweise die ersten Zyklus-Strukturen in jeder Reihe aus Abb. 3.2 tatsächlich von den anderen zu unterscheiden. Eine Beschreibung, die genau dieser physikalischen Gegebenheit Rechnung trägt, ist mit Hilfe eines N -Tupels (C_1, C_2, \dots, C_N) möglich. Dabei soll C_n wie schon in Gl. (3.46) die Anzahl der Zyklen der Länge n bedeuten. Solche N -Tupeln sind in Abb. 3.2 unter den jeweiligen Permutationen angegeben. An diesem Beispiel sieht man schon, dass wir bei einem Drei-Teilchen-Ensemble statt der 6 Permutationen nur 3 physikalisch verschiedene vorliegen haben. Diese Reduktion setzt sich für größere Ensembles in noch größerem Ausmaß fort.

Für die weitere Implementierung der gerade beschriebenen verbesserten Permutations-Zählung bemerken wir zuerst Folgendes. In der Gleichung (3.46) ist die Tupelstruktur (C_1, \dots, C_N) noch von der jeweiligen Permutation P abhängig. Doch das lässt sich auch umkehren, und jede Permutation als eine Kombination verschiedener C_n darstellen. Die Summation über alle Permutationen geht dann in die Summation über alle verschiedenen Tupeln (C_1, \dots, C_N) über. Allerdings entsprechen einem festen N -Tupel (C_1, \dots, C_N) mehrere mathematisch verschiedene Permutationen, was wir der Abb. 3.2 entnehmen können. Diesen Umstand müssen wir durch den Multiplizitätsfaktor $M(C_1, \dots, C_N)$ mitberücksichtigen und erhalten statt (3.46) zunächst

$$Z_N^{(0)B}(\beta) = \frac{1}{N!} \sum_{C_1, \dots, C_N}^{(\sum n C_n = N)} M(C_1, \dots, C_N) \prod_{n=1}^N [Z_1(n, \beta)]^{C_n} . \quad (3.47)$$

Zur Berechnung des Multiplizitätsfaktors $M(C_1, \dots, C_N)$ bemerken wir, dass es bei einem festen Tupel (C_1, \dots, C_N) insgesamt $N!$ mögliche Kombinationen gibt. Dies sehen wir beispielsweise an dem Dreier-Tupel $(C_1 = 1, C_2 = 1, C_3 = 0)$ mit den möglichen Kombinationen $(1)(23)$, $(1)(32)$, $(2)(31)$, $(2)(13)$, $(3)(12)$, $(3)(21)$ oder auch im Falle $(C_1 = 0, C_2 = 0, C_3 = 1)$ mit den Kombinationen (123) , (132) , (231) , (213) , (312) , (321) . In beiden Fällen gibt es also insgesamt $3! = 6$ Möglichkeiten. Dabei können wir jedoch bemerken, dass sie selbst aus kombinatorischer Sicht nicht immer verschiedene Permutationen darstellen. So sind z.B. Kombinationen (213) und (132) absolut identisch, denn beide sind Darstellungen der Permutation $\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix}$. Daher kommen sie in der Permutationsgruppe nur einmal vor. Um eine andere Sorte identischer Kombinationen zu nennen, betrachten wir die Kombinationen $(1)(3)(2)$ und $(1)(2)(3)$. Diese sind wiederum identisch, da sie beide Darstellungen der Permutation $\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}$ sind. Allgemein lässt sich sogar sagen:

(I). Durch Vertauschung der Zyklen derselben Länge entstehen keine neue Permutationen, und das sind bei C_n Zyklen der Länge n gerade $C_n!$ Vertauschungen.

(II). Durch zyklische Vertauschungen der Elemente innerhalb eines Zyklus entstehen keine neue

Permutationen, und das sind bei der Zykluslänge n gerade n Stück.

Also gilt für den Multiplizitätsfaktor ganz allgemein [43,76,77]

$$M(C_1, \dots, C_N) = \frac{N!}{\prod_{n=1}^N C_n! n^{C_n}} . \quad (3.48)$$

Damit sind wir in der Lage, die Zustandssumme (3.47) in einer geschloßenen Form als

$$Z_N^B(\beta) = \sum_{C_1, \dots, C_N}^{(\sum n C_n = N)} \prod_{n=1}^N \frac{1}{C_n!} \left[\frac{Z_1(n\beta)}{n} \right]^{C_n} \quad (3.49)$$

zu schreiben. Diese Gleichung stellt eine leicht verallgemeinerte Version der von Feynman gefundenen Zustandssumme für Bosonen [43]. Ihr wichtigster Vorteil gegenüber der Beziehung (3.46) besteht in der Zahl der verschiedenen Summanden. Hier wächst sie nur noch algebraisch mit der Teilchenzahl N an und das ist wesentlich langsamer als die ursprünglichen $N!$ Terme in (3.46) [80]. Der einzige Wermutstropfen dabei ist die Tatsache, dass weitere Berechnungen nach (3.49) einer expliziten Kenntnis der Zyklus-Zerlegungen bedürfen, die nach der Nebenbedingung $\sum_n n C_n = N$ erlaubt sind. Das ist für genügend große Teilchenzahlen auch mit einem leistungsstarken Computer nur schwer zu realisieren. Dennoch wird es uns im nächsten Unterabschnitt gelingen, eine effizientere Berechnungs-Vorschrift mit Hilfe einer Rekursions-Beziehung für die Zustandssummen bosonischer Ensembles zu gewinnen.

3.1.3 Großkanonische Zustandssumme und kanonische Rekursion

Ausgehend vom Resultat (3.49) für die kanonische Zustandssumme bosonischer Ensembles werden wir in diesem Unterabschnitt in der Lage sein, wie bereits in [43] gezeigt, die großkanonische Zustandssumme zu berechnen. Diese dient uns des weiteren als die Erzeugende für alle kanonischen N -Teilchen-Zustandssummen [73] und ihre Projektion auf ein N -Teilchen-Zustand liefert schließlich die gesuchte Rekursions-Beziehung.

Zuerst beschäftigen wir uns mit der großkanonischen Zustandssumme, die wir bereits im Abschnitt 2.1.2 diskutiert haben. Diese kann als eine Mittelung über alle kanonischen Zustandssummen mit Hilfe der so genannten Fugazität $z \equiv e^{\beta\mu}$ aufgefasst werden, wobei μ das chemische Potential darstellt. Die konkrete Beziehung zwischen den beiden statistischen Größen lautet

$$Z_{GK}^B(\beta, z) \equiv \sum_{N=0}^{\infty} Z_N^B(\beta) z^N . \quad (3.50)$$

Zur weiteren Untersuchung dieses Ausdrucks setzen wir hierfür die explizite Form der kanonischen Zustandssummen (3.49) ein. Die im z -Exponenten von (3.50) verwendete Teilchenzahl muss dafür

entsprechend der Gleichung $N = \sum_n n C_n$ umgeschrieben werden, so dass sich die Identität

$$\begin{aligned} Z_{GK}^B(\beta, z) &= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{C_1, \dots, C_N}^{(\sum n C_n = N)} \prod_{n=1}^{\infty} \frac{1}{C_n!} \left[\frac{Z_1(n\beta) z^n}{n} \right]^{C_n} \\ &= \sum_{C_1=0}^{\infty} \sum_{C_2=0}^{\infty} \dots \prod_{n=1}^{\infty} \frac{1}{C_n!} \left[\frac{Z_1(n\beta) z^n}{n} \right]^{C_n} \end{aligned} \quad (3.51)$$

ergibt. Gleich im ersten Schritt haben wir statt des Produktes über $n=1, 2, \dots, N$ wie in (3.49) das Produkt über alle positiven ganzzahligen Werte $n \in \mathbb{N}$ geschrieben. Dies ist aber nur eine reine Formalität, denn aufgrund der Nebenbedingung $\sum_n n C_n = N$ gilt $C_n = 0$ für alle $n > N$, so dass die zusätzlichen Faktoren triviale Einsen sind. Weiterhin bemerken wir noch, dass in der letzten Form die Nebenbedingung $N = \sum_n n C_n$ nicht mehr explizit vorkommt. Aufgrund dieser Vereinfachung können wir die nun identischen Summen mit dem Produkt vertauschen und erhalten

$$Z_{GK}^B(\beta, z) = \prod_{n=1}^{\infty} \sum_{C_n=0}^{\infty} \frac{1}{C_n!} \left[\frac{Z_1(n\beta) z^n}{n} \right]^{C_n}. \quad (3.52)$$

Die C_n -Summe ergibt die Exponentialfunktion, so dass wir damit

$$Z_{GK}^B(\beta, z) = \exp \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{Z_1(n\beta) z^n}{n} \right\} \quad (3.53)$$

erhalten. Weiterhin können wir daraus die mittlere großkanonische Teilchenzahl nach der Gleichung $\langle N \rangle^{B,F} \equiv z \partial \ln Z_{GK}^{B,F} / \partial z$ finden:

$$\langle N(\beta, z) \rangle^B = \sum_{n=1}^{\infty} z^n Z_1(n\beta). \quad (3.54)$$

Mit der Spektral-Darstellung (3.39) lässt sich diese Gleichung noch weiter umformen, so dass sich die mittlere Teilchenzahl zu

$$\langle N(\beta, z) \rangle^B = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{z^{-1} e^{\beta E_{\mathbf{k}}} - 1} \quad (3.55)$$

ergibt. Mit der Fugazität $z = e^{\beta \mu}$ entspricht das für Bosonen gerade der Bose-Einstein-Verteilung (1.3) bzw. (2.85).

In der obigen Darstellung haben wir mit der kanonischen Zustandssumme für ununterscheidbare Teilchen begonnen und sind durch die Mittelung über alle möglichen Teilchenzahlen bei der großkanonischen Zustandssumme angelangt. Diese Vorgehensweise lässt sich aber auch umkehren, denn die großkanonische Zustandssumme (3.50) hat noch gleichzeitig die Eigenschaft, die Erzeugende für alle kanonischen Zustandssummen zu sein [73]. Das sehen wir z.B. daran, dass in der Reihendarstellung (3.50) die kanonischen Zustandssummen Z_N^B als Taylor-Entwicklungs-Koeffizienten des großkanonischen Ausdrucks fungieren. Als solche sind sie durch die Gleichung

$$Z_N^B(\beta) = \frac{1}{N!} \left. \frac{\partial^N Z_{GK}^B(\beta, z)}{\partial z^N} \right|_{z=0} \quad (3.56)$$

gegeben. Die großkanonische Zustandssumme darin entnehmen wir (3.53) und erhalten daraus zuerst die Zustandssumme des Vakuums, in dem sich kein Teilchen befindet ($N=0$):

$$Z_0^B(\beta) = Z_{GK}^B(\beta, z) \Big|_{z=0} = 1 . \quad (3.57)$$

Des weiteren sei nun $N \geq 1$. Für diesen Fall können wir mit einer unmittelbar aus (3.53) folgenden Feststellung beginnen:

$$\frac{\partial Z_{GK}^B(\beta, z)}{\partial z} = Z_{GK}^B(\beta, z) \sum_{k=1}^{\infty} Z_1(k\beta) z^{k-1} . \quad (3.58)$$

Dies stellt eine selbstkonsistente Differentialgleichung für die großkanonische Zustandssumme dar, die rekursiv gelöst werden kann. Dazu berechnen wir ausgehend von der obigen Form die N -te Ableitung der großkanonischen Zustandssumme:

$$\frac{\partial^N Z_{GK}^B(\beta, z)}{\partial z^N} \Big|_{z=0} = \sum_{n=1}^N \frac{(N-1)!}{(n-1)!(N-n)!} \frac{\partial^{N-n} Z_{GK}^B(\beta, z)}{\partial z^{N-n}} \sum_{k=1}^{\infty} Z_1(k\beta) \frac{\partial^{n-1} z^{k-1}}{\partial z^{n-1}} \Big|_{z=0} . \quad (3.59)$$

Unter Berücksichtigung der Identität

$$\frac{\partial^{n-1} z^{k-1}}{\partial z^{n-1}} \Big|_{z=0} = (n-1)! \delta_{k,n} \quad (3.60)$$

erhalten wir ferner

$$\frac{\partial^N Z_{GK}^{(0)B}(\beta, z)}{\partial z^N} \Big|_{z=0} = (N-1)! \sum_{n=1}^N \frac{1}{(N-n)!} \frac{\partial^{N-n} Z_{GK}^{(0)B}(\beta, z)}{\partial z^{N-n}} \Big|_{z=0} Z_1(n\beta) . \quad (3.61)$$

Erinnern wir uns jetzt noch an die Relation (3.56), so erhalten wir die gesuchte Rekursionsgleichung für die N -Teilchen-Zustandssumme

$$Z_N^B(\beta) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N Z_1(n\beta) Z_{N-n}^B(\beta) . \quad (3.62)$$

Diese Formel ist übrigens bereits von Landsberg in seinem Lehrbuch zur Thermodynamik [78] benutzt worden, wurde dann aber vergessen und zuerst von Sato für Fermionen [79] und dann von Borrmann und Franke für Bosonen [80] wiederentdeckt worden. Die hier dargestellte Herleitung basiert auf den Arbeiten [73,74]. Ausgehend vom Rekursionsanfang in (3.57) lassen sich damit die Zustandssummen mit immer größeren Teilchenzahlen berechnen. Aus diesen können dann die thermodynamischen Eigenschaften von Bose-Gasen berechnet werden. Die konkrete Implementierung der Formel (3.62) wird im Abschnitt 3.2 anhand spezieller Systeme erläutert.

3.1.4 Kondensationseffekte in kanonischen Ensembles

Wie wir bereits im einleitenden Kapitel 1 gesehen haben, kann die Bose-Einstein-Kondensation mit der Besetzung des Grundzustandes erklärt werden. Um diese Größe zu bestimmen, müssen

wir die Wahrscheinlichkeit angeben, mit der ein Teilchen im Grundzustand zu finden ist. Im großkanonischen Ensemble wurde diese unmittelbar durch den aus der Bose-Einstein-Verteilung (2.85) bestimmten Grundzustand-Anteil gegeben. Im kanonischen Ensemble spielt die Bose-Einstein-Verteilung jedoch keine große Rolle. Die Herleitung der Besetzung eines beliebigen energetischen Zustandes und so auch des Grundzustandes ist hier nicht direkt einsichtig. Genau diese Besetzung leiten wir in diesem Unterabschnitt ab und halten uns dabei an die Darstellung in der kürzlich veröffentlichten Publikation [42].

Als Ausgangspunkt unserer Untersuchungen dient uns die kanonische Zustandssumme, die wir nun als eine Gewichtungsfunktion für den Grundzustand benutzen wollen. Für ein kanonisches Ensemble aus N Teilchen eignet sich dazu am besten die Form (3.49). Um den Beitrag des Grundzustandes daraus zu extrahieren, schreiben wir den darin vorkommenden Ausdruck für den geschlossenen n -Zyklus ausgehend von (3.39) in der Form

$$Z_1(n, \beta) \equiv \gamma_n(\beta) + \xi_n(\beta) \quad (3.63)$$

aus. Dabei soll γ_n den Beitrag des Grundzustandes

$$\gamma_n(\beta) \equiv e^{-n\beta E_G} \quad (3.64)$$

und ξ_n den Beitrag der restlichen angeregten Zustände

$$\xi_n(\beta) = \sum'_{\mathbf{k}} e^{-n\beta E_{\mathbf{k}}} \quad (3.65)$$

darstellen, wobei der Strich über dem Summenzeichen eine Summation über die Beiträge aller Zustände außer dem Grundzustand bedeuten soll. Unter Berücksichtigung der binomialen Zerlegungsformel

$$[Z_1(n, \beta)]^{C_n} = \sum_{m_n=0}^{C_n} \frac{C_n!}{m_n! (C_n - m_n)!} [\gamma_n(\beta)]^{m_n} [\xi_n(\beta)]^{C_n - m_n} \quad (3.66)$$

lässt sich die N -Teilchen-Zustandssumme (3.49) umformen zu

$$Z_N^B(\beta) = \sum_{C_1, \dots, C_N}^{(\sum n C_n = N)} \sum_{m_1=0}^{C_1} \dots \sum_{m_N=0}^{C_N} [\gamma_1(\beta)]^{\sum_{n=1}^N n m_n} \prod_{n=1}^N \frac{[\xi_n(\beta)]^{C_n - m_n}}{n^{C_n} m_n! (C_n - m_n)!} \quad (3.67)$$

Dabei haben wir die Eigenschaft des Grundzustand-Beitrags (3.64) ausgenutzt, entsprechend der Beziehung $\gamma_n(\beta) = \gamma_1^n(\beta)$ zu faktorisieren.

Nun widmen wir uns dem Gewicht der Teilchen im Grundzustand. Um die Vorgehensweise zu veranschaulichen, betrachten wir zuerst als Beispiel eine Ensemble aus drei Teilchen. Die Zustandssumme können wir für diesen Fall nach einigem Aufwand aus (3.67) ablesen als

$$Z_3^B = \gamma_1^0 \left(\frac{1}{6} \xi_1^3 = \frac{1}{2} \xi_1 \xi_2 + \frac{1}{3} \xi_3 \right) + \gamma_1^1 \left(\frac{1}{2} \xi_1^2 + \frac{1}{2} \xi_2 \right) + \gamma_1^2 \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right) \xi_1 + \gamma_1^3 \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right). \quad (3.68)$$

Im ersten Term befinden sich alle Teilchen in allen drei Kombinationen in angeregten Zuständen, im zweiten Term ist ein Teilchen im Grundzustand und zwei andere in angeregten Zuständen, im dritten Term befinden sich zwei und im vierten alle drei Teilchen im Grundzustand. Entsprechend dieser Beobachtung können wir das statistische Gewicht W_3^B der Grundzustand-Teilchen in einem 3-Teilchen-Ensemble als

$$\begin{aligned} W_3^B = & 0 \times \gamma_1^0 \left(\frac{1}{6} \xi_1^3 + \frac{1}{2} \xi_1 \xi_2 + \frac{1}{3} \xi_3 \right) + 1 \times \gamma_1^1 \left(\frac{1}{2} \xi_1^2 + \frac{1}{2} \xi_2 \right) \\ & + 2 \times \gamma_1^2 \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right) \xi_1 + 3 \times \gamma_1^3 \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right) \end{aligned} \quad (3.69)$$

angeben. Dabei wird jeder einzelne Beitrag mit der Zahl der darin enthaltenen Grundzustand-Teilchen multipliziert. Diese Zahl entspricht immer der jeweiligen Potenz von γ_1 . In der Gleichung (3.67) ist diese Potenz für eine feste Wahl von (m_1, m_2, \dots, m_N) gleich $\sum_{n=1}^N nm_n$. Das gilt uns nun auch als der Gewichtungsfaktor des Beitrages mit dieser (m_1, m_2, \dots, m_N) -Wahl, so dass sich das statistische Gewicht der Grundzustand-Teilchen allgemein als

$$W_N^B = \sum_{C_1, \dots, C_N}^{\sum n C_n = N} \sum_{m_1=0}^{C_1} \dots \sum_{m_N=0}^{C_N} \left(\sum_{n=1}^N nm_n \right) \gamma_1^{\sum_{n=1}^N nm_n} \prod_{n=1}^N \frac{\xi_n^{C_n - m_n}}{n^{C_n} m_n! (C_n - m_n)!} \quad (3.70)$$

schreiben lässt. Um die Bedeutung dieser Größe zu verdeutlichen, bemerken wir, dass sich die mittlere Teilchenzahl im Grundzustand eines N -Teilchen-Ensembles damit nach

$$\langle N_G \rangle_N^B = \frac{W_N^B(\beta)}{Z_N^B(\beta)} \quad (3.71)$$

ergibt.

Zur weiteren Berechnung dieser Größe bemerken wir zuerst, dass sich (3.70) mit der trivialen Umformungsregel

$$\left(\sum_{n=1}^N nm_n \right) \gamma_1^{\sum_{n=1}^N nm_n} = \gamma_1 \frac{\partial}{\partial \gamma_1} \gamma_1^{\sum_{n=1}^N nm_n} \quad (3.72)$$

als

$$W_N^B = \gamma_1 \frac{\partial}{\partial \gamma_1} Z_N^B \quad (3.73)$$

umschreiben lässt. Definieren wir jetzt die Erzeugende für Grundzustands-Gewichte nach einer zu (3.50) analogen Formel

$$W_{GK}^B(\beta, z) \equiv \sum_{N=0}^{\infty} W_N^B(\beta) z^N, \quad (3.74)$$

so erhalten wir dafür mit Hilfe der Erzeugenden für die Zustandssummen (3.50)

$$W_{GK}^B = \gamma_1 \frac{\partial}{\partial \gamma_1} Z_{GK}^B. \quad (3.75)$$

Die Erzeugende der Zustandssummen entnehmen wir der Gleichung (3.53) und schreiben sie mit Hilfe der Zerlegung (3.63) um:

$$Z_{GK}^B = \exp \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} (\gamma_1^n + \xi_n) \frac{z^n}{n} \right\} . \quad (3.76)$$

Nach (3.75) ergibt sich daraus die Identität

$$W_{GK}^B = Z_{GK}^B \sum_{n=1}^{\infty} \gamma_1^n z^n , \quad (3.77)$$

aus der wir nun auch eine effiziente Bestimmungsgleichung für kanonische Grundzustands-Gewichte gewinnen können.

Zuerst bemerken wir, dass sich die statistischen Gewichte W_N^B aus deren Erzeugenden (3.74) als die Taylor-Entwicklungs-Koeffiziente

$$W_N^B(\beta) = \frac{1}{N!} \left. \frac{\partial^N W_{GK}^B(\beta, z)}{\partial z^N} \right|_{z=0} \quad (3.78)$$

ergeben. Nach (3.77) erhalten wir aber mit der Produktregel der Ableitung

$$\left. \frac{\partial^N W_{GK}^B}{\partial z^N} \right|_{z=0} = \sum_{l=0}^N \frac{N!}{l! (N-l)!} \frac{\partial^{N-l} Z_{GK}^B}{\partial z^{N-l}} \sum_{n=1}^{\infty} \gamma_1^n \left. \frac{\partial^l z^n}{\partial z^l} \right|_{z=0} . \quad (3.79)$$

Nun bemerken wir, dass der $l = 0$ -Summand auf der rechten Seite verschwindet und für die Ableitung der Fugazität ansonsten die Identität (3.60) gilt. Erinnern wir uns außerdem noch an die Gleichung (3.56) für die Zustandssumme, dann erhalten wir die endgültige Formel für die kanonischen Grundzustands-Gewichte:

$$W_N^B(\beta) = \sum_{n=1}^N \gamma_1^n(\beta) Z_{N-n}^B(\beta) . \quad (3.80)$$

Diese Gleichung ist nicht rekursiv und erfordert die Kenntnis der kanonischen Zustandssummen. Die letzteren können aber nach (3.62) rekursiv gewonnen werden. Die anschließende Auswertung von (3.80) ist geradezu trivial.

Die mittlere Teilchenzahl im Grundzustand (3.71) berechnet sich daraus zu

$$\langle N_G \rangle_N^B = \sum_{n=1}^N \gamma_1^n(\beta) \frac{Z_{N-n}^B(\beta)}{Z_N^B(\beta)} . \quad (3.81)$$

Im Abschnitt 3.2 wird diese Größe für konkrete Potentiale ausgewertet und gilt somit als eine wichtige Testgröße für verwendete Näherungen.

3.1.5 Propagator im kanonischen N -Teilchen-Ensemble

In diesem Abschnitt diskutieren wir den Propagator in einem kanonischen Ensemble aus N Bosonen. Diese Größe beinhaltet unter anderem die Information über die lokale Teilchen-Dichte in einem Bose-Gas sowie über die Langdistanz-Eigenschaften darin. Im Folgenden beginnen wir mit der Ein-Teilchen-Dichtematrix, die wir anschließend für weitere Berechnungen der N -Teilchen-Propagatoren verwenden.

Die Ein-Teilchen-Dichtematrix kann in einem bosonischen N -Teilchen-Ensemble in Analogie zur Zustandssumme (3.14) als die unvollständige Spur der Imaginärzeit-Amplitude über $N - 1$ von insgesamt N Teilchenorten entsprechend der Gleichung

$$\rho_N^B(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1; \beta) \equiv \int d^3x_2 \dots d^3x_N (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N; \hbar\beta | \mathbf{x}'_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N; 0)^B \quad (3.82)$$

definiert werden. Mit der expliziten Form für die bosonische Imaginärzeit-Amplitude (3.12) und der Faktorisierungseigenschaft (3.37) erhalten wir dann

$$\begin{aligned} \rho_N^B(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1; \beta) &\equiv \frac{1}{N!} \sum_P \int d^3x_2 \dots d^3x_N (\mathbf{x}_{P(1)}; \hbar\beta | \mathbf{x}'_1; 0) \\ &\quad \times (\mathbf{x}_{P(2)}; \hbar\beta | \mathbf{x}_2; 0) \dots (\mathbf{x}_{P(N)}; \hbar\beta | \mathbf{x}_N; 0) . \end{aligned} \quad (3.83)$$

Jetzt definieren wir in Analogie zum Beitrag eines geschlossenen Zyklus (3.42) denjenigen eines offenen Zyklus der Länge k

$$g_k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1; \beta) \equiv \int d^3x_2 \dots d^3x_k (\mathbf{x}_1; \hbar\beta | \mathbf{x}_k; 0) \dots (\mathbf{x}_3; \hbar\beta | \mathbf{x}_2; 0) (\mathbf{x}_2; \hbar\beta | \mathbf{x}'_1; 0) . \quad (3.84)$$

Unter Verwendung der Zeittranslations-Invarianz (3.32) und der Gruppeneigenschaft (3.31) reduziert sich dieser Ausdruck zu

$$g_k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1; \beta) = (\mathbf{x}_1; k\hbar\beta | \mathbf{x}'_1; 0) . \quad (3.85)$$

Die Ein-Teilchen-Dichtematrix (3.83) zerfällt in Analogie zur Zustandssumme (3.41) für bosonischen Ensembles in Zyklusbeiträge verschiedener Länge. Allerdings gibt es in der Ein-Teilchen-Dichtematrix neben den geschlossenen Zyklen $h_n(\beta) = Z_1(n\beta)$ einen offenen Zyklus $g_k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1; \beta)$, während in der Zustandssumme alle Zyklen geschlossen sind. Mit dieser Feststellung können wir die unkomplette Analogie zu der Darstellung der Zustandssumme (3.47) ausnutzen und schreiben

$$\rho_N^B(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1; \beta) = \frac{1}{N!} \sum_{k=1}^N \sum_{C_1, \dots, C_N}^{(\sum nC_n = N-k)} \tilde{M}(k, C_1, \dots, C_N) g_k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1; \beta) \prod_{n=1}^{N-k} [Z_1(n\beta)]^{C_n} . \quad (3.86)$$

Wohlgemerkt haben wir hierbei gegenüber der Formel (3.47) lediglich einen Zyklus $Z_1(k\beta)$ mit einer nichtverschwindenden Länge k absepariert und durch den Ausdruck $g_k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1; \beta)$ ersetzt. Außerdem muss hierbei ein etwas anderer Multiplizitätsfaktor verwendet werden als der ursprüngliche Faktor (3.48) für die Zustandssumme. So ist z. B. zu bemerken, dass der Ort \mathbf{x}_1 bzw. \mathbf{x}'_1 eine gegenüber den restlichen $N - 1$ Orten ausgezeichnete Rolle spielt. Sie sind nämlich mit Sicherheit

in dem offenen Zyklus der Länge k zu finden, und dafür gibt es k verschiedenen Möglichkeiten, wie nach der Regel (II) vor der Gleichung (3.48) zu sehen. Die restlichen $N-1$ Teilchenorte haben insgesamt $(N-1)!$ Möglichkeiten, innerhalb des offenen Zyklus oder der restlichen geschlossenen Zyklen platziert zu werden. Somit beträgt die Gesamtzahl der verschiedenen Schreibweisen aller möglichen Permutationen $k(N-1)!$. Doch nicht alle dieser Schreibweisen ergeben mathematisch verschiedene Permutationen, es sind nämlich $1! k^1 \prod_{n=1}^{N-k} C_n! n^{C_n}$ davon bei einem gegebenen Tupel (k, C_1, \dots, C_N) gleich. Das können wir in Analogie zu dem entsprechenden Faktor für die Zustandssumme nach den Regeln (I) und (II) vor der Beziehung (3.48) feststellen. Es ergibt sich insgesamt also für den Multiplizitätsfaktor

$$\tilde{M}(k, C_1, \dots, C_N) = \frac{k(N-1)!}{1! k^1 \prod_{n=1}^{N-k} C_n! n^{C_n}} = \frac{(N-1)!}{\prod_{n=1}^{N-k} C_n! n^{C_n}} . \quad (3.87)$$

Einsetzen dieser Identität in die Gleichung (3.86) ergibt schließlich die Ein-Teilchen-Dichtematrix

$$\rho_N^B(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1; \beta) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N g_k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1; \beta) \sum_{C_1, \dots, C_N}^{(\sum n C_n = N-k)} \prod_{n=1}^{N-k} \frac{1}{C_n!} \left[\frac{Z_1(n, \beta)}{n} \right]^{C_n} . \quad (3.88)$$

Durch Vergleich mit dem Resultat (3.49) für die Zustandssumme der Bosonen ergibt sich zusammen mit der Beziehung (3.85) die endgültige Formel für die Dichtematrix

$$\rho_N^B(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1; \beta) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (\mathbf{x}_1; k\hbar\beta | \mathbf{x}'_1; 0) Z_{N-k}^B(\beta) . \quad (3.89)$$

Das ist das zentrale Ergebnis dieses Abschnitts und kann beispielsweise auch dazu verwendet werden, die N -Teilchen-Zustandssumme herzuleiten [81]. Dazu bemerken wir nur, dass die Spur der Dichtematrix nach (3.82) die bosonische N -Teilchen-Zustandssumme (3.14) entsprechend der Gleichung

$$Z_N^B(\beta) = \int d^3x \rho_N^B(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1; \beta) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N Z_1(k, \beta) Z_{N-k}^B(\beta) \quad (3.90)$$

wiedergibt. Für die rechte Seite verwendeten wir dabei noch die Beziehung (3.44). Interessanterweise ist das genau die Gleichung (3.62) aus dem Abschnitt 3.1.3 für den bosonischen Fall. Des Weiteren kann die Beziehung (3.89) dazu verwendet werden, den Propagator in einem bosonischen N -Teilchen-Ensemble herzuleiten.

Zuerst bemerken wir an dieser Stelle, dass der symmetrisierte N -Teilchen-Zustand (3.8) eine gewisse Ähnlichkeit zum Vielteilchenzustand (2.5) aus dem Abschnitt 2.1 zeigt. Er lässt sich nämlich mit Hilfe der Erzeugungsoperatoren $\hat{a}^\dagger(\mathbf{x}_i)$ der Teilchen an den jeweiligen Orten \mathbf{x}_i als

$$|\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N\rangle^B = \frac{1}{\sqrt{N!}} \hat{a}^\dagger(\mathbf{x}_1) \hat{a}^\dagger(\mathbf{x}_2) \dots \hat{a}^\dagger(\mathbf{x}_N) |vak\rangle \quad (3.91)$$

schreiben, wobei der Ausdruck $|vak\rangle$ dem Vakuumzustand entspricht. Die Erzeugungsoperatoren müssen selbst der Kommutatorbeziehung

$$[\hat{a}^\dagger(\mathbf{x}_i), \hat{a}^\dagger(\mathbf{x}_j)]_- = 0 \quad (3.92)$$

genügen, um die Symmetrie (3.8) der Zustände zu garantieren. Weiterhin lassen sich Vernichtungsoperatoren einführen, die den Vakuumzustand entsprechend der Beziehung $\hat{a}(\mathbf{x}_i)|vak\rangle = 0$ vernichten und die Kommutatorrelationen

$$[\hat{a}(\mathbf{x}_i), \hat{a}(\mathbf{x}_j)]_- = 0 \quad , \quad [\hat{a}(\mathbf{x}_i), \hat{a}^\dagger(\mathbf{x}_j)]_- = \delta(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \quad (3.93)$$

erfüllen. An dieser Stelle können wir noch die Wirkung der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren auf den N -Teilchen-Zustand (3.8) angeben. Die erstere lautet

$$\hat{a}^\dagger(\mathbf{x}) |\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N\rangle^B = \sqrt{N+1} |\mathbf{x}, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N\rangle^B \quad (3.94)$$

und ist aufgrund der Darstellung (3.91) unmittelbar einsichtig. Der Erzeugungsoperator erhöht außerdem noch die Teilchenzahl in einem Zustand und macht aus einer N -Form eine $N+1$ -Form. Die Wirkung des Vernichtungsoperators kann mit Hilfe der zweiten Relation aus (3.93) hergeleitet werden mit dem Ergebnis

$$\hat{a}(\mathbf{x}) |\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N\rangle^B = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) |\mathbf{x}_1, \dots, \hat{\mathbf{x}}_i, \dots, \mathbf{x}_N\rangle^B \quad , \quad (3.95)$$

wobei $\hat{\mathbf{x}}_i$ das Fehlen des i -ten Teilchens bezeichnet. Daraus sehen wir, dass der Vernichtungsoperator in der Tat ein Teilchen vernichtet, und zwar an allen möglichen Orten, wodurch eine $N-1$ -Form entsteht.

Des Weiteren brauchen wir noch die Imaginärzeit-abhängigen Heisenbergschen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren in einem N -Teilchen-Zustand. Diese definieren wir als

$$\hat{a}_N(\mathbf{x}, \tau) \equiv e^{\tau \hat{H}_{N-1}/\hbar} \hat{a}(\mathbf{x}) e^{-\tau \hat{H}_N/\hbar} \quad , \quad (3.96)$$

$$\hat{a}_N^\dagger(\mathbf{x}, \tau) \equiv e^{\tau \hat{H}_{N+1}/\hbar} \hat{a}^\dagger(\mathbf{x}) e^{-\tau \hat{H}_N/\hbar} \quad , \quad (3.97)$$

so dass eine gewisse Analogie zu den zeitabhängigen Operatoren (2.50) und (2.51) im großkanonischen Formalismus besteht. Es sei jedoch darauf hingewiesen, dass die Exponentialfunktionen vor und nach $\hat{a}_N(\mathbf{x})$ und $\hat{a}_N^\dagger(\mathbf{x})$ diesmal keine zueinander adjungierten Operatoren darstellen, weil die entsprechenden Hamilton-Operatoren in jeweils verschiedenen Hilbert-Räumen wirken.

Der Ein-Teilchen-Propagator in einem Ensemble aus N Bosonen kann in einer zu (2.49) ähnlichen Form definiert werden. Aufgrund der Nichtunitarität der Entwicklungsoperatoren empfiehlt sich jedoch hierfür, die Zeitordnung (2.52) explizit auszuschreiben:

$$G_N(\mathbf{x}'_1, \tau_b; \mathbf{x}_1, \tau_a) = \frac{1}{Z_N^B(\beta)} \lim_{\epsilon \searrow 0} \text{Tr}_N \left\{ e^{-\beta \hat{H}_N} \left[\Theta(\tau_b - \tau_a - \epsilon) \hat{a}_{N+1}(\mathbf{x}'_1, \tau_b) \hat{a}_N^\dagger(\mathbf{x}_1, \tau_a) \right. \right. \\ \left. \left. + \Theta(\tau_a - \tau_b + \epsilon) \hat{a}_{N-1}^\dagger(\mathbf{x}_1, \tau_a) \hat{a}_N(\mathbf{x}'_1, \tau_b) \right] \right\} \quad . \quad (3.98)$$

So wie im Abschnitt 2.1.3, musste die Heavisidesche Stufenfunktion auch diesmal für die gleichen Imaginärzeiten $\tau_a = \tau_b$ mit Hilfe des infinitesimalen Parameters ϵ vervollständigt werden. Das wurde

für die obige Gleichung in Analogie zur Vorschrift (2.63) gemacht. Nun lässt sich der Propagator (3.98) noch gemäß

$$G_N(\mathbf{x}'_1, \tau_b; \mathbf{x}_1, \tau_a) = \lim_{\epsilon \searrow 0} \left\{ \Theta(\tau_b - \tau_a - \epsilon) G_N^R(\mathbf{x}'_1, \tau_b; \mathbf{x}_1, \tau_a) + \Theta(\tau_b - \tau_a + \epsilon) G_N^A(\mathbf{x}'_1, \tau_b; \mathbf{x}_1, \tau_a) \right\} \quad (3.99)$$

zerlegen, wobei im ersten Summanden der retardierte Propagator und im zweiten der avancierte Propagator vorkommt.

Der retardierte Anteil des Propagators lässt sich mit N -Teilchen-Zuständen (3.8) explizit als

$$\begin{aligned} G_N^R(\mathbf{x}'_1, \tau_b; \mathbf{x}_1, \tau_a) &= \frac{1}{Z_N^B(\beta)} \int d^3 x_2 \dots d^3 x_{N+1} {}^B \langle \mathbf{x}_{N+1}, \dots, \mathbf{x}_2 | e^{-(\hbar\beta - \tau_b)\hat{H}_N/\hbar} \hat{a}(\mathbf{x}'_1) e^{-(\tau_b - \tau_a)\hat{H}_{N+1}/\hbar} \\ &\quad \times \hat{a}^\dagger(\mathbf{x}_1) e^{-\tau_a \hat{H}_N/\hbar} | \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_{N+1} \rangle^B \\ &= \frac{1}{Z_N^B(\beta)} \int d^3 x'_2 \dots d^3 x'_{N+1} \int d^3 x''_2 \dots d^3 x''_{N+1} {}^B \langle \mathbf{x}''_{N+1}, \dots, \mathbf{x}''_2 | e^{-(\hbar\beta + \tau_a - \tau_b)\hat{H}_N/\hbar} \\ &\quad \times | \mathbf{x}'_2, \dots, \mathbf{x}'_{N+1} \rangle^B \cdot {}^B \langle \mathbf{x}'_{N+1}, \dots, \mathbf{x}'_2 | \hat{a}(\mathbf{x}'_1) e^{-(\tau_b - \tau_a)\hat{H}_{N+1}/\hbar} \hat{a}^\dagger(\mathbf{x}_1) | \mathbf{x}''_2, \dots, \mathbf{x}''_{N+1} \rangle^B \end{aligned} \quad (3.100)$$

ausschreiben, wobei wir im letzten Schritt die Vollständigkeitsrelation der bosonischen Zustände (3.9) angewendet haben. Der letzte Matrixelement in (3.100) kann jetzt noch mit Hilfe (3.94) und deren adjungierten Relation ausgerechnet werden zu

$$\begin{aligned} &{}^B \langle \mathbf{x}'_{N+1}, \dots, \mathbf{x}'_2 | \hat{a}(\mathbf{x}'_1) e^{-(\tau_b - \tau_a)\hat{H}_{N+1}/\hbar} \hat{a}^\dagger(\mathbf{x}_1) | \mathbf{x}''_2, \dots, \mathbf{x}''_{N+1} \rangle^B \\ &= (N+1) (\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2, \dots, \mathbf{x}'_{N+1}; \tau_b | \mathbf{x}_1, \mathbf{x}''_2, \dots, \mathbf{x}''_{N+1}; \tau_a)^B \\ &= \frac{(N+1) N!}{(N+1)!} \sum_{i=1}^{N+1} (\mathbf{x}'_1, \dots, \hat{\mathbf{x}}'_i, \dots, \mathbf{x}'_{N+1}; \tau_b | \mathbf{x}''_2, \dots, \mathbf{x}''_{N+1}; \tau_a)^B (\mathbf{x}'_i; \tau_b | \mathbf{x}_1; \tau_a) . \end{aligned} \quad (3.101)$$

Im ersten Schritt haben wir die Imaginärzeit-Amplitude (3.10) für $N+1$ Bosonen verwendet. Im zweiten kam noch die Permutations-Darstellung (3.12) dazu, um daraus die \mathbf{x}_1 enthaltende Einzelteilchen-Amplitude nach (3.37) abzuseparieren. Die Wiedereinsetzung dieses Matrixelements in (3.100) und Verwendung der Vollständigkeitsrelation (3.9) vereinfacht den retardierten Propagator zu

$$\begin{aligned} G_N^R(\mathbf{x}'_1, \tau_b; \mathbf{x}_1, \tau_a) &= \frac{1}{Z_N^B(\beta)} (\mathbf{x}'_1; \tau_b | \mathbf{x}_1; \tau_a) \int d^3 x'_2 \dots d^3 x'_{N+1} (\mathbf{x}'_2, \dots, \mathbf{x}'_{N+1}; \hbar\beta | \mathbf{x}'_2, \dots, \mathbf{x}'_{N+1}; 0)^B \\ &\quad + \frac{1}{Z_N^B(\beta)} \sum_{i=2}^{N+1} \int d^3 x'_2 \dots d^3 x'_{N+1} (\mathbf{x}'_1, \dots, \hat{\mathbf{x}}'_i, \dots, \mathbf{x}'_{N+1}; \hbar\beta | \mathbf{x}'_2, \dots, \mathbf{x}'_{N+1}; 0)^B (\mathbf{x}'_i; \tau_b | \mathbf{x}_1; \tau_a) . \end{aligned} \quad (3.102)$$

Das Integral im ersten Summanden stellt nach der Identität (3.14) die N -Teilchen-Zustandssumme dar. Der zweite Summand lässt sich ebenfalls noch stark vereinfachen, indem man eine einfache Umbenennung der Variablen vornimmt, z.B.: $\mathbf{x}'_i \mapsto \mathbf{x}'_{N+1}$, $\mathbf{x}'_{N+1} \mapsto \mathbf{x}'_N$, $\mathbf{x}'_N \mapsto \mathbf{x}'_{N-1}$ usw. bis

schließlich $\mathbf{x}'_{i+1} \mapsto \mathbf{x}'_i$, und für $j < i$ soll gelten $\mathbf{x}'_j \mapsto \mathbf{x}'_j$ (keine Änderung). Wenn man noch die Tatsache ausnutzt, dass die Reihenfolge der Orte in jeweiligen bosonischen Zuständen nach der Eigenschaft (3.13) frei wählbar ist, dann erhalten wir aus (3.102)

$$G_N^R(\mathbf{x}'_1, \tau_b; \mathbf{x}_1, \tau_a) = (\mathbf{x}'_1; \tau_b | \mathbf{x}_1; \tau_a) \quad (3.103)$$

$$+ \frac{1}{Z_N^B(\beta)} \sum_{i=2}^{N+1} \int d^3 x'_2 \dots d^3 x'_{N+1} (\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2, \dots, \mathbf{x}'_N; \hbar\beta | \mathbf{x}'_{N+1}, \mathbf{x}'_2, \dots, \mathbf{x}'_N; 0)^B (\mathbf{x}'_{N+1}; \tau_b | \mathbf{x}_1; \tau_a) .$$

Interessanterweise hängt das Integral jetzt überhaupt nicht mehr von dem Index i ab, so dass die i -Summe lediglich einen Faktor N liefert. Zur weiteren Umformung dieser Gleichung kommt uns die Ein-Teilchen-Dichtematrix (3.82) zugute, mit deren Hilfe sich

$$G_N^R(\mathbf{x}'_1, \tau_b; \mathbf{x}_1, \tau_a) = (\mathbf{x}'_1; \tau_b | \mathbf{x}_1; \tau_a) + \frac{N}{Z_N^B(\beta)} \int d^3 x'_{N+1} \rho_N^B(\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_{N+1}; \beta) (\mathbf{x}'_{N+1}; \tau_b | \mathbf{x}_1; \tau_a) \quad (3.104)$$

ergibt. Im nächsten Schritt erinnern wir uns noch an die Beziehung (3.89) und führen die letzte Integration mit Hilfe der Gruppeneigenschaft (3.31) aus. Damit ergibt sich schließlich

$$G_N^R(\mathbf{x}'_1, \tau_b; \mathbf{x}_1, \tau_a) = \frac{1}{Z_N^B(\beta)} \sum_{k=0}^N (\mathbf{x}'_1; k\hbar\beta + \tau_b | \mathbf{x}_1; \tau_a) Z_{N-k}^B(\beta) , \quad (3.105)$$

und das ist die endgültige Formel für den retardierten Propagator.

Jetzt berechnen wir noch den avancierten Propagator, der den zweiten Summanden in (3.98) darstellt. Mit den N -Teilchen-Zuständen (3.8) und den zeitabhängigen Operatoren (3.96) und (3.97) ergibt sich dessen explizite Form:

$$G_N^A(\mathbf{x}'_1, \tau_b; \mathbf{x}_1, \tau_a) = \frac{1}{Z_N^B(\beta)} \int d^3 x_2 \dots d^3 x_{N+1} {}^B \langle \mathbf{x}_{N+1}, \dots, \mathbf{x}_2 | e^{-(\hbar\beta - \tau_a) \hat{H}_N / \hbar} \hat{a}^\dagger(\mathbf{x}_1) e^{-(\tau_a - \tau_b) \hat{H}_{N-1} / \hbar}$$

$$\times \hat{a}(\mathbf{x}'_1) e^{-\tau_b \hat{H}_N / \hbar} | \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_{N+1} \rangle^B \quad (3.106)$$

$$= \frac{1}{Z_N^B(\beta)} \int d^3 x'_2 \dots d^3 x'_N \int d^3 x''_2 \dots d^3 x''_N {}^B \langle \mathbf{x}''_N, \dots, \mathbf{x}''_2 | e^{-(\tau_a - \tau_b) \hat{H}_{N-1} / \hbar}$$

$$\times | \mathbf{x}'_2, \dots, \mathbf{x}'_N \rangle^{BB} \langle \mathbf{x}'_N, \dots, \mathbf{x}'_2 | \hat{a}(\mathbf{x}'_1) e^{-(\hbar\beta + \tau_b - \tau_a) \hat{H}_N / \hbar} \hat{a}^\dagger(\mathbf{x}_1) | \mathbf{x}''_2, \dots, \mathbf{x}''_N \rangle^B ,$$

wobei wir noch für die letzte Gleichung die Vollständigkeitsrelation (3.9) angewendet haben. Vergleicht man den letzten Integral mit dem entsprechenden Ausdruck für den retardierten Propagator aus (3.100), so bemerkt man eine große Ähnlichkeit. Der einzige Unterschied besteht darin, dass die Zahl $N+1$ in allen Ausdrücken zu N wurde (die Zustandssumme Z_N^B blieb dabei dennoch ungeändert) und eine Verschiebung der Imaginärzeit von τ_b zu $\hbar\beta + \tau_b$ vollzogen wurde. Diese formelle Ähnlichkeit zieht sich selbstverständlich durch alle Rechnungen durch, so dass sich am Ende das zu (3.105) ähnliche Resultat

$$G_N^A(\mathbf{x}'_1, \tau_b; \mathbf{x}_1, \tau_a) = \frac{1}{Z_N^B(\beta)} \sum_{k=1}^N (\mathbf{x}'_1; k\hbar\beta + \tau_b | \mathbf{x}_1; \tau_a) Z_{N-k}^B(\beta) \quad (3.107)$$

ergibt. Neben den oben erwähnten Verschiebungen der Variablen wurde für diese Gleichung noch der Summationsindex k in (3.105) durch $k+1$ ersetzt.

Der gesamte zeitgeordnete Propagator ergibt sich nach (3.99) mit dem retardierten Anteil (3.105) und dem avancierten Propagator (3.107) zu

$$G_N(\mathbf{x}'_1, \tau_b; \mathbf{x}_1, \tau_a) = \frac{1}{Z_N^B(\beta)} \lim_{\epsilon \searrow 0} \left\{ \Theta(\tau_b - \tau_a - \epsilon) \sum_{k=0}^N + \Theta(\tau_a - \tau_b + \epsilon) \sum_{k=1}^N \right\} \\ \times (\mathbf{x}'_1; k\hbar\beta + \tau_b | \mathbf{x}_1; \tau_a) Z_{N-k}^B(\beta) . \quad (3.108)$$

Der Spezialfall des imaginärzeitlich lokalen Propagators lautet

$$G_N(\mathbf{x}'_1, \tau; \mathbf{x}_1, \tau) = \frac{1}{Z_N^B(\beta)} \sum_{k=1}^N (\mathbf{x}'_1; k\hbar\beta | \mathbf{x}_1; 0) Z_{N-k}^B(\beta) \quad (3.109)$$

und gleicht damit bis auf den Vorfaktor $N/Z_N^B(\beta)$ der Ein-Teilchen-Dichtematrix (3.89). Setzt man weiterhin die Anfangs- und Endorte gleich und integriert darüber, so ergibt sich mit (3.44) aufgrund der Rekursionsbeziehung (3.62) bzw. (3.90) die Teilchenzahl:

$$\int d^3x G_N(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}, \tau) = \frac{1}{Z_N^B(\beta)} \sum_{k=1}^N Z_1(k\beta) Z_{N-k}^B(\beta) = N . \quad (3.110)$$

Daraus ist weiterhin ersichtlich, dass der zeitlich und örtlich lokale Propagator der Teilchendichte

$$n_N(\mathbf{x}) = G_N(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}, \tau) \quad (3.111)$$

in einem N -Teilchen-Ensemble entspricht.

3.2 Kanonische Untersuchungen für spezielle Potentiale

Die kanonische Zustandssumme und die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen im Grundzustand-Kondensat zu finden, wurden im letzten Abschnitt für wechselwirkungsfreie Bose-Gase allgemein hergeleitet. In diesem Abschnitt werden diese kanonischen Ergebnisse durch die Wahl der Ein-Teilchen-Potentiale spezifiziert. Im ersten Unterabschnitt diskutieren wir den Spezialfall des homogenen Bose-Gases, das heißt den Fall ohne Hintergrundpotential. Die naive Vorgehensweise wird sich dabei jedoch als gänzlich ungeeignet und unphysikalisch herausstellen. Es liegt jedoch nicht an prinzipiellen Problemen des kanonischen Ensembles bei Beschreibungen der endlichen Systeme, sondern nur an den Näherungen, die man dabei macht. Denn, wie bereits in der Publikation [42] geschildert, kann die Situation durch den gesondert berücksichtigten Grundzustand korrigiert werden. Weiterhin kann das homogene Problem als eine Approximation des Kastenpotentials betrachtet werden, welches im anschließenden Unterabschnitt quantenmechanisch exakt behandelt wird. Außerdem wird noch der für Experimente relevante Fall des harmonischen Potentials behandelt.

3.2.1 Spezialfall des homogenen Bose-Gases

In diesem Unterabschnitt beschreiben wir zuerst das von Feynmann in seinem Textbuch [43] untersuchte Modell des homogenen Bose-Gases. Hierbei stoßen wir jedoch auf Hinweise, dass das so behandelte Problem prinzipiell unphysikalisch und missverständlich ist, was sich in Komplikationen bei Berechnungen der Wärmekapazität und der Grundzustand-Besetzung äußert. Anschließend diskutieren wir die konstruktiv verbesserte Version des homogenen Problems, mit der sich auch die gerade erwähnten Größen sinnvoll auswerten lassen.

Der hier behandelte Fall zeichnet sich durch das fehlende Hintergrundpotential aus, und zwar in einem endlichen aber dennoch derart großen Volumen V , dass wir die Randeffekte vernachlässigen können. Dieses Problem wurde von uns in der großkanonischen Ensemble-Theorie bereits im Abschnitt 2.2 behandelt. Die Wellenfunktionen sind für diesen Fall durch (2.88) und die Energieeigenwerte durch (2.90) gegeben. Das Energiespektrum ist dabei kontinuierlich, so dass die Summe über alle Zustände ebenfalls nach (2.90) als ein Impulsintegral darstellbar ist. Damit ergibt sich die Ein-Teilchen-Imaginärzeitamplitude (3.34) zu

$$(\mathbf{x}', \tau_b | \mathbf{x}, \tau_a) = \left[\frac{M}{2\pi\hbar(\tau_b - \tau_a)} \right]^{3/2} \exp \left\{ -\frac{M}{2\hbar} \frac{(\mathbf{x}' - \mathbf{x})^2}{\tau_b - \tau_a} \right\}. \quad (3.112)$$

Weiterhin ergibt sich daraus nach der Spurbildung in (3.44) in einem endlichen Volumen V der Beitrag eines geschlossenen n -Zyklus zur kanonischen Zustandssumme

$$Z_1(n\beta) = \frac{V}{\lambda^3} \frac{1}{n^{3/2}}, \quad (3.113)$$

wobei λ die thermische de Broglie-Wellenlänge aus (2.93) darstellt. Mit diesem Beitrag der geschlossenen n -Zyklen erhalten wir aus der allgemeinen Formel (3.62) die für den homogenen Fall spezifizierte Rekursionsbeziehung

$$Z_N^B(\beta) = \frac{V}{N\lambda^3} \sum_{n=1}^N \frac{1}{n^{3/2}} Z_{N-n}^B(\beta). \quad (3.114)$$

Für viele Probleme ist es sinnvoll, die dimensionslose Einheit der reduzierten Temperatur $t \equiv T/T_c^{(0)}$ zu verwenden. Dabei stellt $T_c^{(0)}$ die kritische Temperatur im thermodynamischen Limes (2.104) aus der großkanonischen Rechnung dar, so dass

$$t = \left(\frac{V}{N\lambda^3} \right)^{2/3} \zeta^{2/3}(3/2) \quad (3.115)$$

gilt mit der Riemannschen Zeta-Funktion $\zeta(\nu)$ aus (2.100). Damit lässt sich die Rekursion (3.114) umschreiben zu

$$Z_N^B(t(N)) = \frac{[t(N)]^{3/2}}{\zeta(3/2)} \sum_{n=1}^N \frac{1}{n^{3/2}} Z_{N-n}^B(t(N)). \quad (3.116)$$

Zur Berechnung der N -Teilchen-Zustandssumme müssen wir demnach alle Zustandssummen für kleinere Teilchenzahlen als N kennen. Das kann nun zu gewissen Verwirrungen bei der Auswertung

der obigen Gleichung führen. Die in (3.115) stehende Größe V/N kann nämlich nicht durchgehend als die reziproke Teilchenzahldichte interpretiert werden. In der Tat ist N/V die Teilchendichte nur für den N -Teilchen-Zustand. Wollen wir diese Dichte als eine feste Größe annehmen, so müssen wir während des gesamten Rekursionsprozesses für die Konstanz des Volumens V sorgen, obwohl sich die Teilchenzahlen permanent ändern. Dies führt dann dazu, dass die Variable t in den Zustandssummen $Z_{N-n}^B(t)$ bei jeder Rekursionsstufe von $t(N-n)$ zu $t(N)$ reskaliert werden muss. Das ist natürlich unpraktikabel und zwingt uns, eine andere dimensionslose Variable zu verwenden. Dafür eignet sich z.B. die nicht explizit teilchenzahlabhängige Größe

$$\tau \equiv \frac{V^{2/3}}{\lambda^2} = \left(\frac{N}{\zeta(3/2)} \right)^{2/3} t, \quad (3.117)$$

die wir im Prinzip bereits in der Gleichung (2.178) definiert haben. Unter Verwendung dieser Variablen bekommt die Rekursion (3.114) die folgende Form:

$$Z_N^B(\tau) = \frac{\tau^{3/2}}{N} \sum_{n=1}^N \frac{1}{n^{3/2}} Z_{N-n}^B(\tau). \quad (3.118)$$

Diese Rekursion kann ohne Probleme ausgewertet werden, wie im Folgenden noch skizziert wird.

Als Rekursionsanfang dient uns die Identität (3.57) mit $Z_0(\tau) = 1$. Ausgehend von dieser geben wir hier die Zustandssummen für ein und zwei Teilchen an:

$$Z_1^B(\tau) = \tau^{3/2}, \quad Z_2^B(\tau) = \frac{\tau^{3/2}}{2^{5/2}} + \frac{\tau^3}{2}, \quad (3.119)$$

Diese Ausdrücke kann man anschließend zur Rekursion der Zustandssumme für drei und mehr Teilchen verwenden. Weiterhin interessieren wir uns für die thermodynamischen Eigenschaften in endlichen bosonischen Ensembles. Ein wichtiger Vertreter dieser ist die Wärmekapazität (2.96), die uns schon vom Abschnitt 2.2.1 bekannt ist. Im kanonischen Ensemble ergibt sie sich nach der einfachen Identität

$$C_N^B = k_B T \frac{\partial^2}{\partial T^2} \left\{ T \ln Z_N^B(T) \right\}. \quad (3.120)$$

Speziell für ein bzw. zwei Teilchen ergeben sich mit (3.119) die folgenden Wärmekapazitäten:

$$C_1^B(\tau) = \frac{3}{2} k_B, \quad C_2^B(\tau) = 3k_B \frac{1 + 9\sqrt{2}\tau^{3/2} + 16\tau^3}{2 + 8\sqrt{2}\tau^{3/2} + 16\tau^3}, \quad (3.121)$$

wenn wir die dimensionslose Variable (3.117) verwenden.

Die Resultate (3.121) sind in Abb. 3.3 a) graphisch dargestellt. Interessanterweise besitzt der Ein-Teilchen-Zustand eine konstante Wärmekapazität, was man auch schon aus (3.121) erkennt. Für größere Teilchenzahlen nähern sich jedoch die Kurven dem Verhalten im thermodynamischen Limes aus Abb. 2.1, die wir aus den großkanonischen Rechnungen im Abschnitt 2.2.2 kennen. Aus der analytischen Untersuchung von (3.121) erhält man im Hochtemperaturlimes $\tau \gg 1$ neben $C_1^B \rightarrow 3k_B/2$ für ein Teilchen noch $C_2^B \rightarrow 3k_B$ für zwei Teilchen, was nun das allgemeine

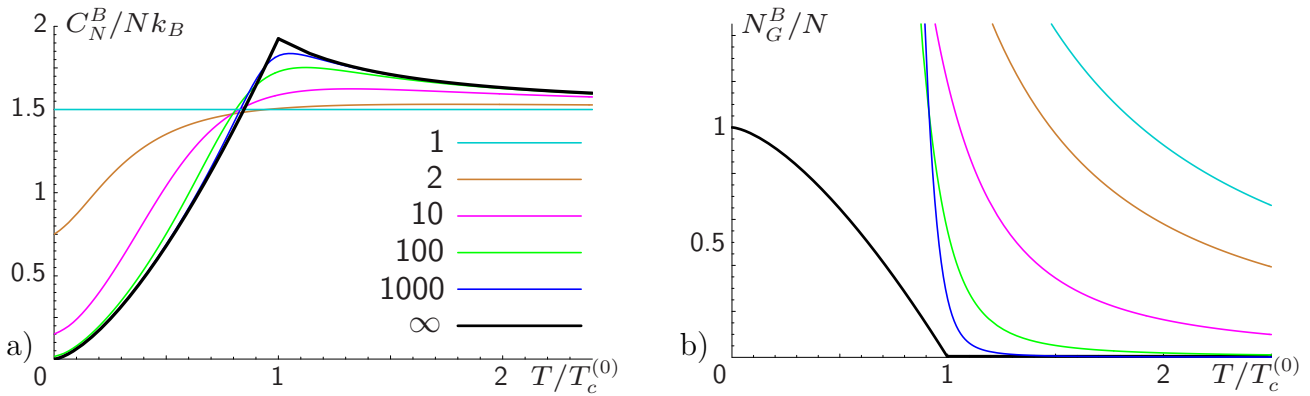


Abbildung 3.3: a) Wärmekapazität pro Teilchen für kanonische Ensembles aus $N = 1, 2, 10, 100, 1000$ Bosonen im homogenen Gas-Modell nach (3.114) und (3.120). b) Wie in a), jedoch für die Grundzustand-Besetzung (3.81). Die jeweiligen schwarzen Kurven stehen für großkanonische Resultate im thermodynamischen Limes aus Abb. 2.1 und 1.2.

Dulong-Petit-Gesetz $C_N^B \rightarrow 3Nk_B/2$ widerspiegelt. Für tiefe Temperaturen mit $\tau \ll 1$ finden wir dagegen aus (3.121) und bei weiterführenden Untersuchungen auch ganz allgemein das von Teilchenzahl N unabhängige Resultat $C_N^B \rightarrow 3k_B/2$. Somit fällt die Wärmekapazität pro Teilchen bei verschwindenden Temperaturen mit steigendem N ab, allerdings ohne dabei zu verschwinden. Dieser Umstand widerspricht dem dritten Hauptsatz der Thermodynamik.

Ein noch gravierenderes Problem des homogenen Bose-Gases wird deutlich, wenn man versucht, den Anteil der Teilchen im Grundzustand zu quantifizieren. Mit der Grundzustands-Energie $E_G = 0$ ergibt sich für den Grundzustands-Beitrag zum n -Zyklus $Z_1(n\beta)$ nach (3.64)

$$\gamma_n(\tau) = 1 . \quad (3.122)$$

Damit können wir beispielsweise die mittleren Teilchenzahlen im Grundzustand für das Ein- und Zwei-Teilchen-Ensemble im homogenen Fall bestimmen. Diese entnehmen wir der Bestimmungsgleichung (3.81) mit den Zustandssummen (3.119) und erhalten

$$\langle N_G \rangle_1^B = \frac{1}{\tau^{3/2}} , \quad \langle N_G \rangle_2^B = \frac{4\sqrt{2}}{\tau^{3/2}} \frac{1 + \tau^{3/2}}{1 + 2\sqrt{2}\tau^{3/2}} . \quad (3.123)$$

Wie man daraus unschwer erkennt, verschwinden diese Mittelwerte bei höheren Temperaturen, aber divergieren bei tieferen. Diese Divergenz ist unphysikalisch, zumal $\langle N_G \rangle_N^B / N$ die Wahrscheinlichkeit angibt, ein Teilchen im Grundzustand zu finden, und somit sinnvollerweise nie größer als eins sein kann.

Um die Wärmekapazität und die Grundzustand-Besetzung für Ensembles mit größeren Teilchenzahlen N zu berechnen, empfiehlt es sich, die N -Teilchen-Zustandssummen aus der Rekursionsbeziehung (3.118) explizit numerisch zu bestimmen. Diese numerische Auswertung ist technisch in der Tat etwas umständlich und ist aus diesem Grund im Anhang C genauer dargestellt. Die Resultate solcher Rechnungen sind jedenfalls in Abb. 3.3 graphisch dargestellt. Wie man daraus erkennt, werden die oben erwähnten Probleme auch für steigende Teilchenzahlen nicht behoben.

Für die Wärmekapazität scheinen die Werte für niedrige Temperaturen mit steigender Teilchenzahl immer stärker unterdrückt zu sein, um im thermodynamischen Limes komplett zu verschwinden. Dennoch entsteht dieser Eindruck nur aufgrund der Normierung der Wärmekapazität auf ein Teilchen. Wie bereits oben erwähnt, ergibt sich am Temperaturnullpunkt für alle Teilchenzahlen ein von Null verschiedener Wert $C_N^B(T=0) = 3k_B/2$. Die Grundzustand-Besetzung aus Abb. 3.3 b) scheint dagegen mit dem durch die schwarze Kurve dargestellten Resultat im thermodynamischen Limes nichts gemein zu haben. Vielmehr scheint die für ein und zwei Teilchen gefundene Divergenz bei tiefen Temperaturen für größere Teilchenzahlen noch stärker ausgeprägt zu sein. Ob diese Unphysikalität der Ergebnisse spezifisch für das kanonische Ensemble ist oder an dem Modell des homogenen Bose-Gases liegt, bedarf noch einer tieferen Untersuchung, die wir im Folgenden schildern werden.

Hierbei erinnern wir uns zuerst an die Probleme mit dem homogenen Bose-Gas innerhalb der großkanonischen Ensemble-Theorie aus Abschnitt 2.2. Dort haben wir nämlich festgestellt, dass die Teilchenzahl unterhalb einer bestimmten kritischen Temperatur nicht festgehalten werden konnte. Im Abschnitt 2.2.2 haben wir jedoch weiterhin gezeigt, dass das nur der Fall war, solange der Grundzustand nicht extra berücksichtigt wurde. Was das im kanonischen Ensemble bedeutet, kann man eigentlich bereits am Ausdruck für den Anteil der angeregten Zustände zum n -Zyklus (3.65) erkennen. Dieser ergibt sich nämlich in einem homogenen System zu

$$\xi_n(\tau) = \frac{\tau^{3/2}}{n^{3/2}} - 1 \quad (3.124)$$

und ist für genügend niedrige Temperaturen negativ. Diese Aussage entzieht sich jeder vernünftigen Interpretation, insbesondere wenn man bedenkt, dass nach Definition (3.65) eine positiv definite Größe vorliegt. In der Tat gibt dies uns einen Hinweis darauf, dass die Näherung (2.90) der kontinuierlichen Integration anstelle der Summation über alle Energiewerte in diesem Fall etwas überstrapaziert wurde. Das haben wir auch schon am Anfang des Abschnitts 2.2.2 diskutiert mit der Feststellung, dass die kontinuierliche Impulsintegration den wichtigen Beitrag des Grundzustandes übersieht. Die Lösung dieses Problems bestand darin, den Grundzustand separat zu behandeln, was in der verbesserten Ersetzungsvorschrift (2.106) resultierte.

Um zu sehen, wie die gerade geschilderte Verbesserung die physikalischen Größen beeinflusst, wenden wir zuerst die Näherung (2.106) an, um die Imaginärzeit-Amplitude (3.34) zu bestimmen. Hier ergibt sich im Unterschied zu (3.112)

$$(\mathbf{x}', \tau_b | \mathbf{x}, \tau_a) = (\mathbf{x}', \tau_b | \mathbf{x}, \tau_a)_G + \left[\frac{M}{2\pi\hbar(\tau_b - \tau_a)} \right]^{3/2} \exp \left\{ -\frac{M}{2\hbar} \frac{(\mathbf{x}' - \mathbf{x})^2}{\tau_b - \tau_a} \right\} \quad (3.125)$$

mit der Grundzustandsamplitude

$$(\mathbf{x}', \tau_b | \mathbf{x}, \tau_a)_G = \psi_0(\mathbf{x}') e^0 \psi_0^*(\mathbf{x}) = \frac{1}{V} \quad , \quad (3.126)$$

die wir mit dem verschwindenden Energieeigenwert aus (2.90) und der konstanten Wellenfunktion $\psi_0(\mathbf{x}) = 1/\sqrt{V}$ aus (2.88) erhalten. Der Beitrag eines n -fachen Zyklus berechnet sich nach (3.44)

aus der Amplitude (3.125) zu

$$Z_1(n\beta) = 1 + \frac{V}{\lambda^3} \frac{1}{n^{3/2}} \quad (3.127)$$

und besteht nun aus zwei Termen

$$\gamma_n(\beta) = 1 \quad , \quad \xi_n(\beta) = \frac{V}{\lambda^3} \frac{1}{n^{3/2}} \quad , \quad (3.128)$$

die entsprechend der Zerlegung (3.63) den Grundzustands-Beitrag und den Anteil der angeregten Teilchen darstellen. Der erste der beiden ist gegenüber (3.122) unverändert geblieben. Der zweite ist jedoch im Gegensatz zum Resultat (3.124) in der Tat für alle Temperaturen positiv.

Vergleicht man die Ein-Teilchen-Zustandssumme aus (3.127) mit der aus (3.113), so sieht man, dass der einzige Unterschied zwischen den beiden nur in einer eins besteht, die vom extra behandelten Grundzustand herrührt. Dies macht sich im Hochtemperatur-Bereich nicht bemerkbar, ist aber im Tieftemperatur-Bereich von entscheidender Bedeutung. So ergibt sich für die Wärmekapazität eines einzigen Teilchens nach (3.120) mit Hilfe der dimensionslosen Temperatur (3.117)

$$C_1^B(\tau) = \frac{3k_B}{2} \frac{5\tau^{3/2} + 2\tau^3}{2 + 4\tau^{3/2} + 2\tau^3} \quad (3.129)$$

im Gegensatz zum früheren Ergebnis (3.121). Im Hochtemperaturbereich ergibt sich daraus näherungsweise $C_1^B(\tau) \approx 3k_B/2$, womit nach wie vor das Dulong-Petit-Gesetz gilt. Für tiefe Temperaturen verschwindet jedoch der Ausdruck (3.129) und erfüllt somit den dritten Hauptsatz der Thermodynamik. In Abb. 3.4 a) ist das unterschiedliche Verhalten der Wärmekapazitäten für ein Teilchen aus (3.121) und (3.129) graphisch verdeutlicht. Die mittlere Teilchenzahl im Grundzustand eines Ein-Teilchen-Systems lässt sich nach (3.81) berechnen mit dem Resultat

$$\langle N_G \rangle_1^B = \frac{1}{1 + \tau^{3/2}} \quad . \quad (3.130)$$

Diese Größe verschwindet für hohe Temperaturen, konvergiert aber gegen den Wert eins von unten im Tieftemperaturlimit und gibt somit das korrekte Temperatur-Verhalten wieder. Der Vergleich zum früheren Ergebnis aus (3.123) ist in Abb. 3.4 b) graphisch illustriert.

Nach diesen ersten Erfolgen der korrigierten Version des homogenen Bose-Gases können wir voranschreiten und die Wärmekapazität und die Grundzustand-Besetzung in größeren Ensembles ausrechnen. Die dazu benötigten Zustandssummen können nach der Rekursion

$$Z_N^B(\tau) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \left[1 + \frac{\tau^{3/2}}{n^{3/2}} \right] Z_{N-n}^B(\tau) \quad (3.131)$$

bestimmt werden, die wir aus (3.62) mit der Spezifizierung (3.127) erhalten. Die jeweiligen mittleren Teilchenzahlen im Grundzustand ergeben sich nach (3.81) mit (3.128) zu

$$\langle N_G \rangle_N^B = \sum_{n=1}^N \frac{Z_{N-n}^B(\tau)}{Z_N^B(\tau)} \quad . \quad (3.132)$$

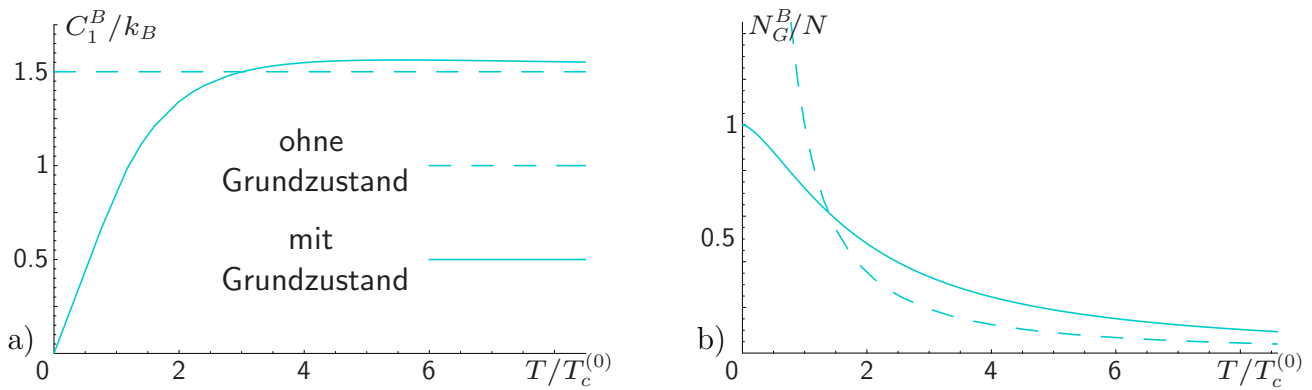


Abbildung 3.4: a) Wärmekapazität für ein einziges Teilchen im homogenen Fall ohne und mit dem extra Grundzustand. b) Dasselbe für die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen im Grundzustand zu finden.

Die Details zur numerischen Auswertung der Zustandssumme nach (3.131) sind im Anhang C dargestellt. Die Ergebnisse für die Wärmekapazität sind aus den jeweiligen Zustandssummen nach der Gleichung (3.120) als die zweifache Ableitung nach der Temperatur herzuleiten. Für die Grundzustand-Besetzung sind sie dagegen unmittelbar aus der Gleichung (3.132) zu entnehmen. In Abb. 3.5 sind einige dieser Resultate graphisch zusammengefasst.

Aus den Graphiken erkennt man ganz deutlich, dass die Wärmekapazitäten im Tieftemperaturbereich für alle Teilchenzahlen verschwinden und somit nun auch dem dritten Hauptsatz der Thermodynamik genügen, ohne für hohe Temperaturen das Dulong-Petit-Gesetz zu verletzen. Für steigende Teilchenzahlen kann man außerdem noch die Konvergenz gegen das Resultat im thermodynamischen Limes beobachten. Noch deutlicher fällt jedoch die positive Tendenz bei der Grundzustand-Besetzung auf. Alle Kurven sind von oben durch eins beschränkt, wie es von einer Wahrscheinlichkeit zu erwarten ist. Zu höheren Temperaturen hin verschwinden die Wahrscheinlichkeiten und erreichen ihren Maximalwert beim Temperaturnullpunkt. Auch hier ist die Tendenz der Kurven zu erkennen, bei größeren Teilchenzahlen dem thermodynamischen Limes immer ähnlicher zu werden. Dass alle Resultate für endliche Ensembles die Werte im thermodynamischen Limes übersteigen, deutet auf einen positiven Finite-Size-Effekt. Genaure Untersuchungen zu diesem Verhalten werden jedoch im nächsten Unterabschnitt durchgeführt, wo wir uns mit der quantenmechanisch exakten Rechnung im Kastenpotential beschäftigen.

An dieser Stelle sei noch betont, dass die Untersuchungen dieses Unterabschnitts in der Tat die Möglichkeit zeigen, das homogene Bose-Gas innerhalb der kanonischen Ensemble-Theorie zu beschreiben. Dass das keine triviale Feststellung ist, zeigen einige Verwirrungen in der Literatur. Da die naiven Rechnungen zum homogenen Bose-Gas keine sinnvollen Resultate zur Grundzustand-Besetzung lieferten, wie wir am Anfang dieses Abschnittes zeigten, sahen sich die Autoren der Arbeit [75] gezwungen, den Kondensatanteil anders zu definieren, als wir es hier taten. Ihre Definition basierte auf der Feststellung von Ceperley (z.B. in Ref. [82]), dass sich die Zyklen mit Windungszahlen $n > 1$ nur bei tieferen Temperaturen ausbilden. Speziell um den kritischen Temperaturwert herum treten vermehrt solch größere Windungszahlen auf, und man kann von einer

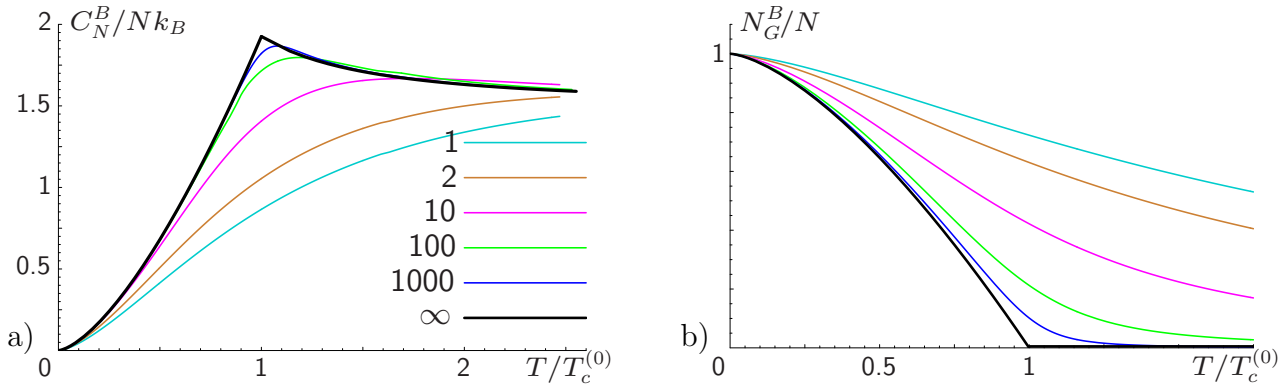


Abbildung 3.5: a) Wärmekapazität und b) die Grundzustand-Besetzung für das System wie in Abb. 3.3, jedoch nach der expliziten Berücksichtigung des Grundzustandes in der Rekursion (3.131).

Proliferation der Zyklen sprechen. In [75] wurde nun dieses Konzept dahingehend ausgenutzt, die Proliferation mit der Bose-Einstein-Kondensation gleich zu setzen. Das scheint auch keine schlechte Idee zu sein, insbesondere angesichts der Tatsache, dass bei der Näherung des homogenen Gases ohne extra Grundzustand am Temperaturnullpunkt nur ein einziger N -Zyklus auftritt, in dem alle Teilchen eingebunden sind. Das erkennt man übrigens bereits aus der Struktur der Rekursion (3.118), wo der Summand mit $n = N$ einen Term der Ordnung $\tau^{3/2}$ liefert, während alle anderen mindestens von der Ordnung τ^3 und somit unterdrückt sind. Nach der allgemeinen Beziehung (3.62) weiß man aber noch, dass der $n = N$ -Term gerade dem N -Zyklus entspricht. Die Untersuchungen des homogenen Bose-Gases mit dem extra Grundzustand liefern jedoch ein etwas anderes Bild. Dort nutzt man die Rekursionsrelation (3.131), in der es zu jedem Summationsindex n einen Term der Ordnung τ^0 gibt. Speziell am absoluten Temperaturnullpunkt ergeben daher genauere Rechnungen, dass alle Windungszahlen mit gleicher Wahrscheinlichkeit $1/N$ auftreten können. Selbstverständlich können sich die Teilchen im energetisch niedrigsten Grundzustand auch in allen möglichen Zyklen aufhalten, im längsten genauso gut wie in den kürzesten Trivialzyklen. Man kann zwar mit Recht behaupten, dass die Teilchen in den längeren Zyklen miteinander energetisch korreliert sind und daher die Zykluslängen eine nicht unwesentliche Rolle bei der Quantifizierung der suprafluiden Dichte spielen, wie z.B. in den Arbeiten [82,83] gezeigt wurde. Mit der Grundzustand-Besetzung hat die Windungszahlstatistik aber nicht direkt etwas zu tun.

Im letzten Teil dieses Abschnitts beschäftigen wir uns noch mit dem Propagator in einem N -Teilchen-Ensemble und insbesondere mit seinem imaginärzeitlich lokalen Spezialfall. Dieser ergibt sich mit der Ein-Teilchen-Imaginärzeit-Amplitude (3.125) nach der Gleichung (3.109) zu

$$G_N(\mathbf{x}', \tau; \mathbf{x}, \tau) = G_{N,G}(\mathbf{x}', \tau; \mathbf{x}, \tau) + \frac{1}{V Z_N^B(\tau)} \sum_{n=1}^N \frac{\tau^{3/2}}{n^{3/2}} \exp \left\{ -\frac{M(\mathbf{x}' - \mathbf{x})^2}{2n\beta\hbar^2} \right\} Z_{N-n}^B(\tau) . \quad (3.133)$$

Dabei repräsentiert der erste Summand den explizit ortsunabhängigen Grundzustand-Anteil zum Propagator

$$G_{N,G}(\mathbf{x}', \tau; \mathbf{x}, \tau) \equiv \frac{1}{V Z_N^B(\tau)} \sum_{n=1}^N Z_{N-n}^B(\tau) . \quad (3.134)$$

Betrachten wir noch den örtlich lokalen Spezialfall des Propagators (3.133), so erhalten wir nach der Beziehung (3.111) die Teilchendichte in einem homogenen System, die sich mit Hilfe der N -Teilchen-Zustandssumme (3.131) unmittelbar als

$$n_N(\mathbf{x}) = \frac{N}{V} \quad (3.135)$$

schreiben lässt. Übrigens lässt sich der Grundzustand-Propagator (3.134) analog dazu unmittelbar mit (3.132) als

$$G_{N,G}(\mathbf{x}', \tau; \mathbf{x}, \tau) = \frac{\langle N_G \rangle_N^B}{V} \quad (3.136)$$

umschreiben. Interessanterweise hängt der Ausdruck auf der rechten Seite der Gleichung nicht vom Ort ab. Somit entspricht es einerseits der Teilchendichte im Grundzustand. Andererseits würde dieser Term auch im Limes $|\mathbf{x}' - \mathbf{x}| \rightarrow \infty$ bestehen bleiben, während der zweite Term in (3.133) verschwinden würde. Darin äußert sich die Langdistanzordnung ODLRO, die wir bereits im Abschnitt 2.5 mit (2.213) im großkanonischen Ensemble festgestellt haben. Offensichtlich besteht diesbezüglich kein Unterschied zwischen den beiden Ensemble-Theorien.

3.2.2 Bose-Gas im Kastenpotential

Im letzten Unterabschnitt behandelten wir den Spezialfall eines homogenen Bose-Gases. Dafür musste künstlich das Volumen V eingeführt werden, um der Forderung nach einer endlichen Teilchenzahldichte zu genügen. Dieses Volumen wurde zwar als endlich angenommen, aber in einer Weise, dass das System explizit keine weitere Informationen darüber enthielt. In diesem Unterabschnitt diskutieren wir nun das Problem eines idealen Bose-Gases, das in einem kubischen Kasten der Kantenlänge L mit dem Potential (2.171) eingesperrt ist. Das Volumen $V = L^3$ hat hierbei eine reale Bedeutung, denn obwohl im Innern des Kastens das Potential verschwindet, wirken sich die Potentialwände mittels Dirichletscher Randbedingungen auf die möglichen Zustände (2.172) aus. Wie stark die Auswirkungen der Randeffekte gerade auf kleinere Ensembles sind, werden wir im Folgenden noch zeigen. Ein analoges Problem haben wir schon im Abschnitt 2.4 aus der Sicht der großkanonischen Ensemble-Theorie studiert. Obwohl die hier präsentierte kanonische Vorgehensweise prinzipiell anders ist als die großkanonische, werden wir hier noch sehen, dass sich die Resultate nur für kleinere Ensembles sichtbar unterscheiden.

Als Ausgangspunkt der Untersuchungen dieses Unterabschnitts dienen uns die diskreten Energieeigenwerte im Kastenpotential (2.173) mit (2.174) und die Wellenfunktionen (2.172). Mit diesen erhalten wir für die Imaginärzeit-Amplitude (3.34)

$$(\mathbf{x}', \tau_b; \mathbf{x}, \tau_a) = \frac{1}{L^3} \prod_{j=1}^3 \left[\sum_{m_j=1}^{\infty} e^{-\frac{\hbar\pi^2(\tau_b-\tau_a)m_j^2}{2ML^2}} \left\{ \cos \frac{\pi m_j(x'_j - x_j)}{L} - (-1)^{m_j} \cos \frac{\pi m_j(x'_j + x_j)}{L} \right\} \right] \quad (3.137)$$

und für den Grundzustand-Anteil davon

$$(\mathbf{x}', \tau_b; \mathbf{x}, \tau_a)_G = \frac{1}{L^3} e^{-3 \frac{\hbar \pi^2 (\tau_b - \tau_a)}{2ML^2}} \prod_{j=1}^3 \left[\cos \frac{\pi(x'_j - x_j)}{L} + \cos \frac{\pi(x'_j + x_j)}{L} \right]. \quad (3.138)$$

Entsprechend der Beziehung (3.44) ergibt sich daraus für den Beitrag eines geschlossenen Zyklus der Länge n

$$Z_1(n\beta) = \left\{ \sum_{m=1}^{\infty} e^{-n\beta \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ML^2} m^2} \right\}^3, \quad (3.139)$$

den wir alternativ dazu auch aus der Spektral-Darstellung (3.45) erhalten können. Für seinen Grundzustand-Anteil (3.64) erhalten wir mit dem nichtverschwindenden Wert der Grundzustandsenergie (2.175)

$$\gamma_n(\beta) = e^{-3n\beta \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ML^2}}. \quad (3.140)$$

Unter Verwendung des dimensionslosen Temperaturparameters (2.178) bzw. (3.117) erhalten wir damit weiterhin die spezifizierte Rekursionsrelation (3.62) zu

$$Z_N^B(\tau) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \left\{ \sum_{m=1}^{\infty} e^{-n\pi m^2 / (4\tau)} \right\}^3 Z_{N-n}^B(\tau). \quad (3.141)$$

Die Grundzustand-Besetzung erhalten wir aus (3.81), so dass sich mit (3.140) daraus

$$\langle N_G \rangle_N^B = \sum_{n=1}^N e^{-3n\pi / (4\tau)} \frac{Z_{N-n}^B(\tau)}{Z_N^B(\tau)} \quad (3.142)$$

ergibt.

Bei Berechnungen der Zustandssumme nach der Rekursion (3.141) ist zu beachten, dass die m -Reihe nur für kleine Parameter τ/n schnell konvergiert und durch einige wenigen Summanden wiedergegeben wird. Für größere Werte dieser Parameter kann die Reihe jedoch nur unzureichend durch eine Summe approximiert werden. Einen analogen Sachverhalt haben wir bereits im Abschnitt 2.4.2 diskutiert. Das Problem wurde dort durch Verwendung der dualen Form (2.184) gelöst, wonach die ursprüngliche Reihe durch

$$\sum_{m=1}^{\infty} e^{-n\pi m^2 / (4\tau)} = \sqrt{\frac{\tau}{n}} - \frac{1}{2} + 2 \sqrt{\frac{\tau}{n}} \sum_{q=1}^{\infty} e^{-4\tau\pi q^2 / n} \quad (3.143)$$

zu ersetzen ist. Die hierbei auftretende Reihe konvergiert nun gerade für große τ/n -Werte schnell und setzt somit die ursprüngliche Reihe in diesem Bereich fort. Für detailliertere Untersuchungen zu dieser Frage sei auf den Abschnitt 2.4.2 verwiesen. Nun sind wir in der Lage, die Rekursionsrelation (3.141) auszuwerten, und zwar nach einem numerischen Verfahren, das im Anhang C erörtert ist. Die dadurch gewonnene N -Teilchen-Zustandssumme kann anschließend dazu verwendet werden, die Wärmekapazität nach der Identität (3.120) zu berechnen. Die entsprechenden Resultate sind in Abb. 3.6 a) und b) graphisch dargestellt.

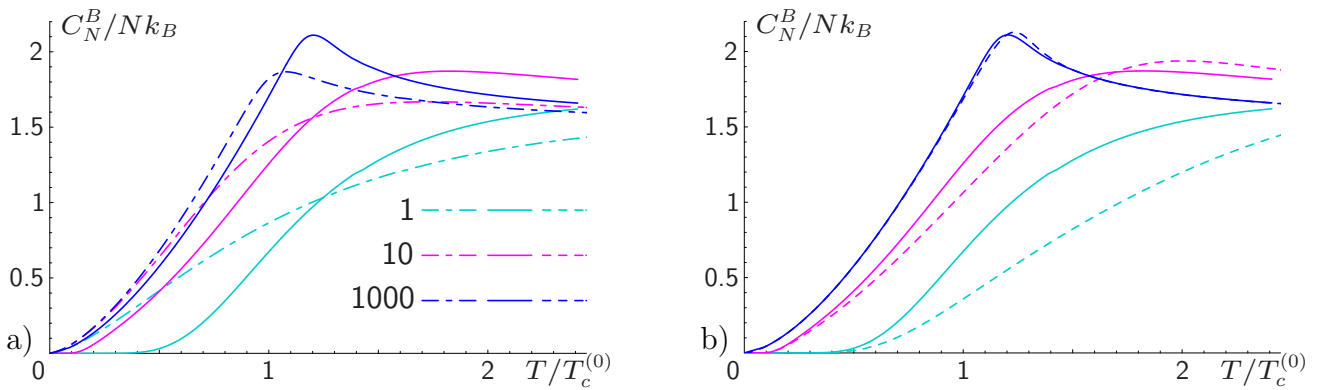


Abbildung 3.6: a) Vergleich der Wärmekapazität pro Teilchen zwischen den exakt quantenmechanischen Resultaten im Kastenpotential für kanonische Ensembles aus $N = 1, 10$ und 1000 Bosonen (durchgezogene Kurven) und den semiklassischen Ergebnissen aus Abb. 3.5 a) (gestrichpunktete Kurven). b) Vergleich zwischen den exakten Resultaten für kanonische Ensembles (durchgezogen) und den großkanonischen Ergebnissen aus Abb. 2.9 b) (gestrichelt).

Aus Abb. 3.6 a) erkennen wir den deutlichen Unterschied zwischen den exakten quantenmechanischen Ergebnissen dieses Abschnitts und den semiklassischen Resultaten aus Abb. 3.5 im letzten Abschnitt. Obwohl sich die entsprechenden Kurven mit steigenden Teilchenzahlen tendenziell annähern, gibt es selbst für $N = 1000$ noch gravierende Unterschiede, welche insbesondere in Temperaturregionen um die Maximallagen der Wärmekapazität sichtbar sind. Weiterhin weist deren Verhalten bei niedrigen Temperaturen für kleinere Ensembles starke Differenzen auf. Auffällig ist dabei die starke exponentielle Unterdrückung der Wärmekapazität nach exakter Rechnung in einem weiten Tieftemperaturbereich. Dieser schrumpft zwar mit steigender Teilchenzahl zusammen, ist aber für $N = 10$ Teilchen noch erkennbar und reicht für ein einziges Teilchen bis zum halben Wert der kritischen Temperatur. Dieser Sachverhalt fehlt der semiklassischen Näherung komplett, was auf den quantenmechanischen Ursprung dieses Effektes schließen lässt. In der Tat ist dafür die nichtverschwindende Energielücke zwischen dem Grundzustand und dem ersten angeregten Zustand verantwortlich, welche von der semiklassischen Näherung mit dem kontinuierlichen Energiespektrum übersehen wird.

Weiterhin haben wir in Abb. 3.6 b) die Resultate der exakten quantenmechanischen Rechnung dieses Abschnitts mit den entsprechenden Ergebnissen in der großkanonischen Ensemble-Theorie aus Abb. 2.9 b) verglichen. Hier sieht man deutlich, wie der Unterschied zwischen den kanonischen und den großkanonischen Wärmekapazitäten mit steigenden Teilchenzahlen verschwindet. In beiden Fällen sieht man auch den Bereich, wo diese Größe exponentiell unterdrückt ist. Allerdings entwickeln sich die Wärmekapazitäten bei einer Temperaturerhöhung über diesen Exponentialbereich hinaus etwas verschieden. So verläuft die großkanonische Kurve für das Ein-Teilchen-System im Tieftemperatur-Bereich noch deutlich flacher als deren kanonisches Gegenstück. Für $N = 1000$ Teilchen ist dagegen der Unterschied speziell im Tieftemperaturbereich kaum erkennbar. Wie bereits in Abschnitt 1.3 des einleitenden Kapitels beschrieben, sind solche Unterschiede zwischen den kanonischen und großkanonischen Resultaten für kleinere Teilchenzahlen nicht sehr verwunderlich, weil der großkanonischen Vorgehensweise ein Mittelungsprozess über Ensembles verschie-

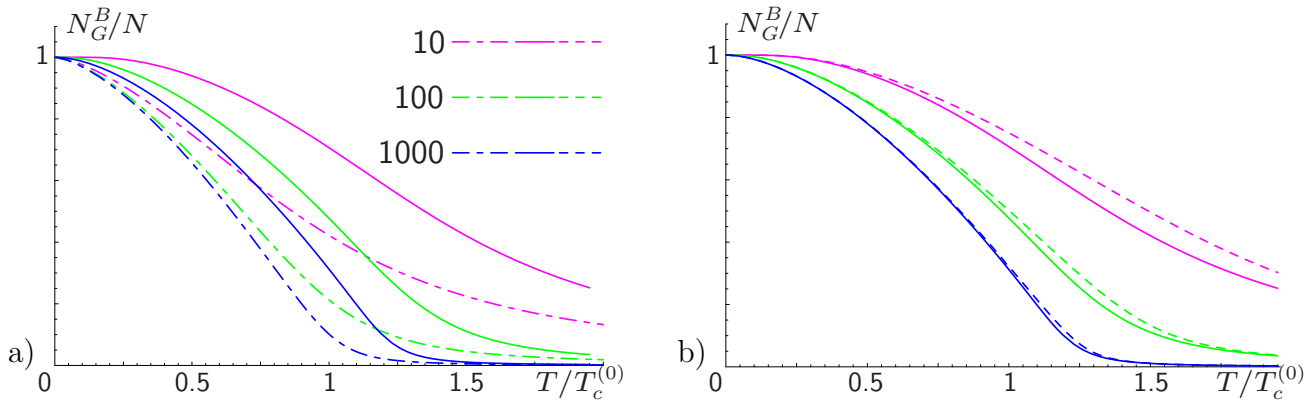


Abbildung 3.7: Wie in Abb. 3.6, jedoch für den Anteil der Teilchen im Grundzustand.

dener Größen inhärent ist, welcher in der kanonischen Ensemble-Theorie der Konstruktion nach wegfällt.

An dieser Stelle diskutieren wir noch die Grundzustand-Besetzung, die uns unmittelbar durch die Gleichung (3.142) gegeben ist. Auf die technischen Details der Rechnung sei auch diesmal auf den Anhang C verwiesen. Die entsprechenden Resultate sind in Abb. 3.7 a) und b) durch die durchgezogenen Kurven für die Teilchenzahlen $N = 10, 100$ und 1000 graphisch dargestellt. In Abb. 3.7 a) sind sie zusammen mit den Resultaten aus der Rechnung zum homogenen System mit dem extra berücksichtigten Grundzustand aus Abb. 3.5 b) aufgetragen. Obwohl letzteres Resultat die führende semiklassische Näherung zum Bose-Gas im Kastenpotential repräsentiert, stellen wir auch bei der Grundzustand-Besetzung nur eine verhältnismässig langsame Annäherung der jeweiligen Resultate mit der steigenden Teilchenzahl fest. Die Abweichung vom thermodynamischen Limes, die den Finite-Size-Effekt darstellt, fällt im exakt behandelten Kastenpotential selbst für $N = 1000$ Teilchen noch viel deutlicher aus als für das homogene Problem (gestrichelte Kurven). Wie man jedoch aus Abb. 3.7 b) sieht, sind derartige Finite-Size-Abweichungen in den kanonischen Resultaten dieses Abschnitts etwas schwächer ausgeprägt als nach den entsprechenden großkanonischen Rechnungen (gestrichelte Kurven).

Der Finite-Size-Effekt lässt sich am deutlichsten an den Lagen der quasikritischen Temperaturen studieren. In Analogie zu großkanonischen Rechnungen im Abschnitt 2.3.3 können wir diese Temperaturen mit den Punkten identifizieren, an denen die Kurvenverläufe für die Grundzustand-Besetzungen ihre maximalen Krümmungen aufweisen. Die so abgelesenen Punkte für Ensembles aus $N = 100, 300, \dots, 100.000$ und 300.000 Teilchen sind in der Abb. 3.8 durch die runden Punkte dargestellt. Die analogen Temperaturwerte aus der großkanonischen Rechnung im Abschnitt 2.4.2 sind wie schon in Abb. 2.7 durch die Dreiecke dargestellt. Wie man daraus erkennt, unterscheiden sich kanonische Resultate von den analogen großkanonischen insbesondere für kleinere Systeme nicht unerheblich. So beträgt die Abweichung für $N = 100$ Teilchen etwa 10%, aber selbst für eine moderate Teilchenzahl von $N = 100.000$ liegt der Unterschied noch im 1%-Bereich.

Die in Abb. 3.8 aufgetragene gestrichelte Kurve stellt das Resultat der numerischen Auswertung der in Abschnitt 2.4.1 gewonnenen Gleichung (2.201) für die großkanonischen quasikritischen Punkte dar. An dieser Stelle möchte man eine ähnliche analytische Kurve auch für die kanonischen

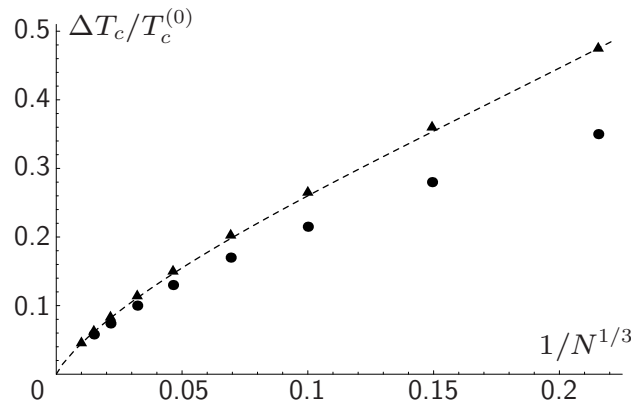


Abbildung 3.8: Verschiebung der kritischen Temperatur gegenüber dem Wert im thermodynamischen Limes $\Delta T_c / T_c^{(0)} = t_c - 1$ für kanonische Ensembles aus $N = 100, 300, \dots, 100.000$ und 300.000 Bosonen im Kastenpotential (runde Punkte von rechts nach links). Zum Vergleich sind die entsprechenden großkanonischen Resultate aus Abb. 2.7 (Dreiecke) dargestellt. Die gestrichelte Linie ist das Resultat der numerischen Auswertung der Gleichung (2.201) im großkanonischen Ensemble.

Ergebnissen finden. Insbesondere interessiert uns hierbei die Frage, ob die Abweichung bereits mit der führenden Ordnung $N^{-1/3}$ oder erst mit $N^{-2/3}$ skaliert. Unmittelbar aus Abb. 3.8 scheint die erste Alternative wohl eher zutreffend zu sein, aufgrund des logarithmischen Anstiegs für sehr große Teilchenzahlen ist das Ablesen jedoch etwas erschwert. Mit den uns bekannten Methoden lässt sich eine analytische Kurve für kanonische Resultate leider nicht finden, so dass wir einer quantitativen Aussage über die Abweichungen zwischen kanonischen und großkanonischen Werten noch schuldig bleiben. Die Gründe dafür werden noch im Folgenden genauer erörtert.

Die Bestimmung der quasikritischen Temperatur direkt aus den kanonischen N -Teilchen-Zustandssummen ist in jedem Fall eine nichtanalytische Prozedur. Das heißt, dass für jede Teilchenzahl N die Rechnung von Neuem gemacht werden muss, so wie es geschah, als wir die Werte der quasikritischen Temperatur aus den maximalen Krümmungen der Grundzustand-Besetzung abgelesen haben. Stattdessen suchen wir nun nach einer einzigen Gleichung, die die Lagen der quasikritischen Temperaturen für alle Teilchenzahlen N angibt. Wie dies möglich ist, haben wir bereits in der semiklassischen Näherung im Rahmen der großkanonischen Ensemble-Theorie im Abschnitt 2.4.1 gesehen. Dass der Erfolg dieser Vorgehensweise nicht allein an der semiklassischen Näherung liegt, ist anhand der kanonischen Rechnungen im letzten Abschnitt 3.2.1 klar. Der Gegenstand der dortigen Untersuchungen war das homogene Bose-Gas, welches als die semiklassische Näherung zum Problem des Bose-Gases im Kastenpotential gesehen werden kann. Diese semiklassische Näherung lieferte zwar die Rekursionsbeziehung (3.131), die etwas einfacher als diejenige im vorliegenden Abschnitt (3.141) ist, von einer analytischen Form kann man dennoch auch dabei nicht sprechen. Dieser Umstand ist vielmehr allen kanonischen Rechnungen gemein und kann nur umgangen werden, wenn wir von der exakt kanonischen Vorgehensweise abrücken. Eine solche semi-kanonische Form der Zustandssumme kann z.B. aus dem großkanonischen Resultat durch die so genannte

Sattelpunkt-Approximation gewonnen werden. Diese Prozedur wird im Abschnitt 3.3 noch genauer diskutiert. An dieser Stelle greifen wir jedoch mit der Feststellung vor, dass diese analytische Vorgehensweise insbesondere in dem uns interessierenden Bereich um die kritische Temperatur nicht zum Erfolg führt. Aus diesem Grund sind wir bei Untersuchungen der quasikritischen Temperatur im kanonischen Ensemble auf die numerischen Ergebnisse aus Abb. 3.8 angewiesen [42].

Nun diskutieren wir noch die Dichte für Bose-Gase in dem Kastenpotential. Auch diesmal gilt unsere Aufmerksamkeit dem Vergleich zwischen dem kanonischen und dem großkanonischen Ensemble, wobei wir den letzteren bereits im Abschnitt 2.5 besprochen haben. Für die kanonischen Untersuchungen gehen wir von der Ein-Teilchen-Imaginärzeit-Amplitude (3.137) aus, dessen örtlich lokale Spezialfall mit den Imaginärzeiten $\tau_a = 0$ und $\tau_b = k\hbar\beta$

$$(\mathbf{x}, k\hbar\beta; \mathbf{x}, 0) = \frac{1}{L^3} \prod_{j=1}^3 \left[\sum_{m_j=1}^{\infty} e^{-k\pi m_j^2/4\tau} \left\{ 1 - \cos \frac{\pi(2x_j + L)m_j}{L} \right\} \right] \quad (3.144)$$

lautet, wobei wir hier noch die reduzierte Temperatur τ aus (3.117) verwendeten (nicht zu verwechseln mit den Imaginärzeiten $\tau_{a,b}$). Die darin vorkommende Reihe konvergiert sehr schnell im Tieftemperaturbereich, ist aber völlig unbrauchbar für höhere Temperaturen. Das ist wiederum ein Umstand, der uns bereits im Abschnitt 2.4.2 begegnete und den wir mittels der Poissonschen Dualitätstransformation (A.7) umgehen können. Nach einigem Rechenaufwand ergibt sich damit der Ausdruck

$$(\mathbf{x}, k\hbar\beta; \mathbf{x}, 0) = \frac{1}{L^3} \left(\frac{\tau}{k} \right)^{3/2} \prod_{j=1}^3 \left[\sum_{q_j=-\infty}^{\infty} \left\{ e^{-\frac{4\pi\tau}{k} q_j^2} - e^{-\frac{4\pi\tau}{k} \left(q_j + \frac{2x_j + L}{2L} \right)^2} \right\} \right]. \quad (3.145)$$

Dieser konvergiert gerade im Hochtemperaturbereich (kleine β) schnell, d.h. nur wenige Summationen mit kleinen Werten von $|q_j|$ sind erforderlich.

Weiterhin verwenden wir nun die Imaginärzeit-Amplitude (3.144) bzw. (3.145), um die Dichte in einem N -Teilchen-Ensemble nach der Beziehung (3.111) auszurechnen. Die Ergebnisse auf der Hauptdiagonale des Kastens $\mathbf{x} = (x, x, x)$ sind für den Temperaturwert, der der kritischen Temperatur im thermodynamischen Limes $T = T_c^{(0)}$ gleicht, in Abb. 3.9 durch die durchgezogenen Kurven dargestellt. Die gestrichelten Linien repräsentieren die entsprechenden großkanonischen Resultate aus Abschnitt 2.5. Vergleicht man die Kurven miteinander, so stellt man für größere Ensembles ab $N = 1000$ Teilchen keine nennenswerten Unterschiede fest. Für kleinere Ensembles unterscheiden sich die Resultate am stärksten am Ursprung, wo die kanonischen Kurven etwas geringere Dichten aufweisen und dafür das Kastenvolumen geringfügig homogener ausfüllen.

Zusammenfassend stellten wir in diesem Abschnitt fest, dass die Dichteverteilung im Kastenpotential genauso wie die thermodynamischen Eigenschaften in den großkanonischen und kanonischen Ensembles identisch sind in dem Sinne, dass sie sich im Limes unendlich großer Teilchenzahlen und Volumina nicht unterscheiden.

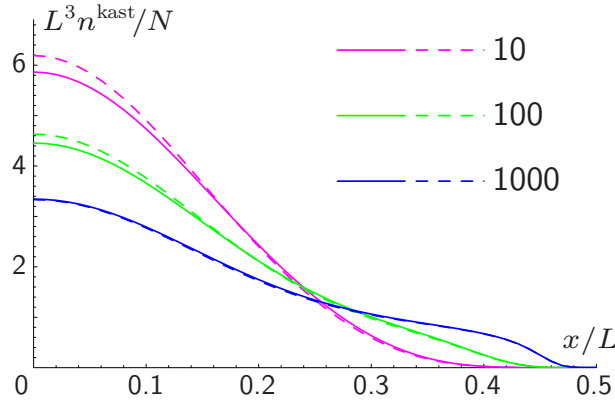


Abbildung 3.9: Dichteverteilung im Kastenpotential der Länge L in Abhängigkeit vom Ort auf der Hauptdiagonalen $\mathbf{x} = (x, x, x)$. Alle Kurven wurden bei einer Temperatur $T = T_c^{(0)}$ ausgewertet, wobei $T_c^{(0)}$ die kritische Temperatur im thermodynamischen Limes (2.104) darstellt. Die durchgezogenen Kurven gelten für kanonische Ensembles aus $N = 10, 100$ und 1000 Teilchen, die gestrichelten für die entsprechenden großkanonischen Gesamtheiten.

3.2.3 Bose-Gase in harmonischen Fallen

In diesem Abschnitt behandeln wir das zum Abschnitt 2.3.3 analoge Problem des idealen Bose-Gases innerhalb der harmonischen Falle (1.7). Diesmal geht es jedoch um seine Beschreibung innerhalb der kanonischen Ensemble-Theorie. Hierbei verzichten wir auf die Diskussion der semi-klassischen Näherungen, da die wichtigsten Aspekte der Rechnung völlig analog zum homogenen Bose-Gas-Modell im Abschnitt 3.2.1 sind. Stattdessen kommen wir direkt zur quantenmechanisch exakten Behandlung des harmonischen Problems und bestimmen die Wärmekapazität und die Grundzustand-Besetzung. Aus Darstellungsgründen beschränken wir uns hier weiterhin auf die Behandlung der isotropen Falle und weisen darauf hin, dass die verallgemeinerte Rechnung im anisotropen Fall in völliger Analogie dazu und ohne Probleme verlaufen würde.

Das Problem eines idealen Bose-Gases wird in der harmonischen Falle allgemein durch die Wellenfunktionen (2.117) mit den dazugehörigen Energieeigenwerten (2.120) gelöst. Mit Hilfe der Mehler-Formel [63] ergibt sich damit für die Ein-Teilchen-Imaginärzeit-Amplitude (3.34)

$$\begin{aligned}
 (\mathbf{x}', \tau_b; \mathbf{x}, \tau_a) &= \left(\frac{M\omega}{\pi\hbar} \right)^{3/2} \left[2 \sinh \omega(\tau_b - \tau_a) \right]^{-3/2} \\
 &\quad \times \exp \left\{ - \frac{M\omega}{2\hbar} \frac{(\mathbf{x}'^2 + \mathbf{x}^2) \cosh \omega(\tau_b - \tau_a) - 2 \mathbf{x}' \mathbf{x}}{\sinh \omega(\tau_b - \tau_a)} \right\}, \quad (3.146)
 \end{aligned}$$

die eine gewisse Ähnlichkeit zum großkanonischen Ausdruck (2.215) hat. Ferner lautet der Grundzustand-Anteil zur Imaginärzeit-Amplitude

$$(\mathbf{x}', \tau_b; \mathbf{x}, \tau_a)_G = \left(\frac{M\omega}{\pi\hbar} \right)^{3/2} e^{-3\omega(\tau_b - \tau_a)/2} \exp \left\{ - \frac{M\omega}{2\hbar} (\mathbf{x}'^2 + \mathbf{x}^2) \right\}. \quad (3.147)$$

Der Beitrag eines geschlossenen n -Zyklus (3.44) zur kanonischen Zustandssumme ergibt sich damit aus (3.44) zu

$$Z_1(n\beta) = \frac{e^{-3n\beta\hbar\omega/2}}{(1 - e^{-n\beta\hbar\omega})^3} \quad (3.148)$$

und dessen Grundzustand-Anteil zu

$$\gamma_n(\beta) = \gamma_1^n(\beta) = e^{-3n\beta\hbar\omega/2} . \quad (3.149)$$

Die beiden letzten Ausdrücke können natürlich alternativ dazu aus den Spektral-Darstellungen (3.45) bzw. (3.64) gefunden werden. Weiterhin verwenden wir in unseren Rechnungen die dimensionslose Temperatureinheit

$$\tau \equiv \frac{1}{\beta\hbar\omega} = \left[\frac{N}{\zeta(3)} \right]^{1/3} \frac{T}{T_c^{(0)}} , \quad (3.150)$$

wobei wir für die letzte Gleichung noch die kritische Temperatur im thermodynamischen Limes (2.134) verwendeten. Damit erhalten wir die Rekursionsgleichung für die N -Teilchen-Zustandssumme (3.62) zu

$$Z_N^B(\tau) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \frac{e^{-3n/2\tau}}{(1 - e^{-3n/\tau})^3} Z_{N-n}^B(\tau) . \quad (3.151)$$

Die mittlere Zahl der Teilchen im Grundzustand, welche der Grundzustand-Besetzung entspricht, ergibt sich nach der Gleichung (3.81) zu

$$\langle N_G \rangle_N^B = \sum_{n=1}^N e^{-3n/2\tau} \frac{Z_{N-n}^B(\tau)}{Z_N^B(\tau)} . \quad (3.152)$$

Aus der N -Teilchen-Zustandssumme erhalten wir nach der allgemeingültigen Beziehung (3.120) die Wärmekapazität des idealen Bose-Gases in der harmonischen Falle. Einige dieser Resultate sind in Abb. 3.10 a) zusammen mit den entsprechenden großkanonischen Ergebnissen dargestellt. Daraus sehen wir, dass die jeweiligen Kurvenverläufe qualitativ ähnlich aussehen, aber quantitative Unterschiede aufweisen, die insbesondere für kleinere Ensembles deutlich sichtbar sind. So sind die kanonischen Resultate tendenziell eher zu niedrigeren Temperaturen hin verschoben, so dass auch das Maximum der Wärmekapazität in einem kanonischen N -Teilchen-Ensemble bei einer niedrigeren Temperatur vorliegt als im großkanonischen Ensemble mit der mittleren Teilchenzahl N . Ein analoger Sachverhalt lässt sich anhand der aus (3.152) gewonnenen Daten für die Grundzustand-Besetzung feststellen. Die entsprechenden Resultate sind in Abb. 3.10 b) zu sehen.

Aus den Verläufen der kanonischen Kurven für die Grundzustand-Besetzung lassen sich weiterhin die quasikritischen Punkte ablesen, an denen die größten Krümmungen vorliegen. Diese sind durch große Punkte in Abb. 3.11 a) dargestellt. Für die großkanonischen Resultate wurde diese Prozedur bereits im Abschnitt 2.3.3 angewandt und lieferte Werte, die in Abb. 2.5 durch die Dreiecke

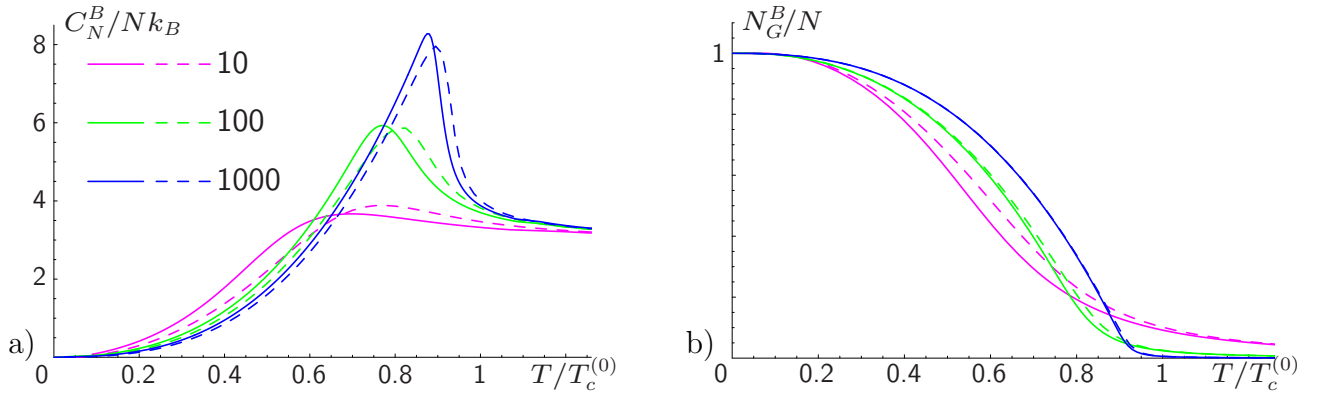


Abbildung 3.10: a) Wärmekapazität pro Teilchen im harmonischen isotropen Fallenpotential für kanonische Ensembles mit $N = 10, 100$ und 1000 Bosonen (durchgezogene Kurve) verglichen mit den großkanonischen Resultaten aus 2.6 (gestrichelte Kurven). b) Wie in a) für die Grundzustand-Besetzung mit den großkanonischen Resultaten aus Abb. 2.4.

dargestellt sind. In Abb. 3.11 a) werden sie nochmals gegenüber den kanonischen Werten gestellt, um den Unterschied im Finite-Size-Verhalten der beiden Ensemble-Theorien zu verdeutlichen. Die quasikritische Temperatur ist niedriger im kanonischen Ensemble, wie es übrigens auch schon im Fall des Kastenpotentials aus Abb. 3.8 war. Der Effekt in der harmonischen Falle ist aber weniger stark ausgeprägt als im Kastenpotential, so ist er für $N = 100$ Teilchen noch etwa Faktor 3 geringer und etwa Faktor 8 für $N = 10.000$ Teilchen.

Die gestrichelte Kurve Abb. 3.11 a) repräsentiert die analytische Näherung aus der großkanonischen Theorie (2.161). Eine analoge kanonische analytische Kurve lässt sich leider in unseren Untersuchungen nicht finden. Die Gründe dafür sind schon am Ende des letzten Abschnitts angeführt wurden. Eine rein kanonische Rechnung lässt sich nämlich prinzipiell nicht in analytischer Form schreiben und eine semi-kanonische Approximation ausgehend vom großkanonischen Resultat ist nicht möglich, wie es im Abschnitt 3.3 erörtert ist.

Nun diskutieren wir hier noch die Dichteverteilung eines idealen Bose-Gases in der harmonischen Falle. Ausgehend von der Imaginärzeit-Amplitude (3.146) erhalten wir mit dem reduzierten Temperaturparameter (3.150) den lokalen Spezialfall zu

$$(\mathbf{x}, k\hbar\beta; \mathbf{x}, 0) = \frac{1}{L_\omega^3 \pi^{3/2}} \left[2 \sinh \frac{k}{\tau} \right]^{-3/2} \exp \left\{ -\frac{\mathbf{x}^2}{L_\omega^2} \tanh \frac{k}{2\tau} \right\}, \quad (3.153)$$

so dass sich die Dichte in einem N -Teilchen-Ensemble nach (3.109) und (3.111) aus der Gleichung

$$n_N(\mathbf{x}) = \frac{1}{L_\omega^3 \pi^{3/2}} \sum_{k=1}^N \left[2 \sinh \frac{k}{\tau} \right]^{-3/2} \exp \left\{ -\frac{\mathbf{x}^2}{L_\omega^2} \tanh \frac{k}{2\tau} \right\} \frac{Z_{N-n}^B(\tau)}{Z_N^B(\tau)} \quad (3.154)$$

berechnen lässt. Unmittelbar daraus lassen sich Resultate für eine feste Temperatur und Teilchenzahl gewinnen, die in Abb. 3.11 b) dargestellt sind. Gegenüber diesen kanonischen Resultaten wurden dort noch die entsprechenden großkanonischen Ergebnisse abgebildet (gestrichelte Kurven), die wir aus der Diskussion im Abschnitt 2.5 entnehmen können. Wie man hieraus erkennen

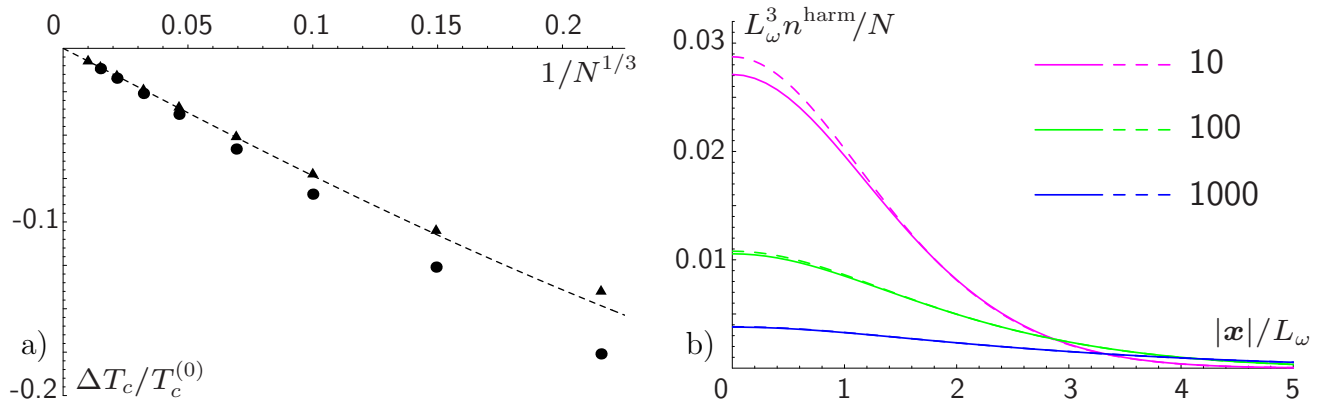


Abbildung 3.11: a) Verschiebung der quasikritischen Temperatur $\Delta T_c/T_c^{(0)} = t_c - 1$ in Abhängigkeit der Teilchenzahl N . Die gestrichelte Linie zeigt den Verlauf nach der großkanonischen semi-klassischen Näherung aus (2.161) und die Dreiecke nach der exakten Berechnung innerhalb der großkanonischen Ensemble-Theorie wie in Abb. 2.5 b). Demgegenüber stehen analoge Resultate der Rechnung im kanonischen Ensemble für $N = 10, 300, \dots, 100.000$ und 300.000 Bosonen (runde Punkte von rechts nach links). b) Dichteverteilung in harmonischen Fällen bei $T = T_c^{(0)}$ für Ensembles aus $N = 10, 100$ und 1000 Teilchen. Die durchgezogenen Kurven sind Resultate in kanonischen und die gestrichelten diejenigen in großkanonischen Ensembles.

kann, sind die Unterschiede nur für kleine Ensembles mit etwa $N = 10$ Teilchen deutlich sichtbar, und zwar in der Nähe des Ursprungs, wo die kanonische Dichte etwas geringer ausfällt als das großkanonische Gegenstück. Natürlich muss dafür die kanonische Dichte in den Randgebieten etwas größer sein, was aber aufgrund der Kleinheit der eigentlichen Werte nicht optisch aufgelöst werden kann.

In diesem Abschnitt haben wir gezeigt, dass auch in einer harmonischen Falle sowohl die thermodynamischen Eigenschaften als auch die Dichteverteilung eines idealen Bose-Gases äquivalent zueinander im kanonischen und großkanonischen Ensemble sind. Im anschließenden Unterabschnitt werden wir versuchen, den Unterschied zwischen den beiden Ensemble-Theorien zu quantifizieren.

3.3 Sattelpunkts-Näherung kanonischer Zustandssummen

Das Ziel dieses Abschnitts ist es, die kanonische N -Teilchen-Zustandssumme näherungsweise aus der großkanonischen Zustandssumme zu bestimmen. Bei dem Näherungsverfahren handelt es sich um die so genannte Approximation der stationären Phase von Darwin und Fowler [84], die auch einfach als Sattelpunkt-Approximation bezeichnet wird. Diese ist z.B. aus den Textbüchern [85, Kapitel 10] bzw. [86, Kapitel 11] wohl bekannt, wo es für Untersuchungen der statistischen Eigenschaften des großkanonischen Ensembles verwendet wurde. Auch für Berechnungen der thermodynamischen Eigenschaften im mikrokanonischen Ensemble aus den kanonischen Resultaten leistet diese Methode gute Dienste, wie z.B. in [87] gezeigt wurde. Dennoch ist aus [86, Kapitel 11] bekannt, dass sich die kanonische Zustandssumme nur in der führenden Ordnung mit dem großkanonischen Resultat nähern lässt. Unterhalb und nahe der kritischen Temperatur lassen sich

nicht einmal die ersten Korrekturen zu diesem Resultat der niedrigsten Ordnung finden. Genau diesen Umstand werden wir im Folgenden erörtern.

Als Ausgangspunkt der Diskussion dient uns die Integral-Darstellung der kanonischen Zustandssumme Z_N^B mit Hilfe des großkanonischen Resultats Z_{GK}^B :

$$Z_N^B(\beta) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\mathcal{C}} \frac{dz}{z^{N+1}} Z_{GK}^B(\beta, z) . \quad (3.155)$$

Die Integrationskontur \mathcal{C} hierin soll die $(N+1)$ -fache Polstelle $z = 0$ einschließen. Diese Darstellung ist nach der Beziehung (3.50) unmittelbar mit dem Residuumsatz verifizierbar und stellt eine Alternative zur Projektions-Vorschrift (3.56) dar. Nach der Umformung $z = e^{\beta\mu}$ können wir noch eine weitere Darstellungsform

$$Z_N^B(\beta) = \frac{\beta}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} d\mu e^{-\beta\mu N} Z_{GK}^B(\beta, \mu) = \frac{\beta}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} d\mu \exp \left\{ -\beta N [\mu + f_{GK}^B(\beta, \mu)] \right\} \quad (3.156)$$

erhalten, wobei $f_{GK}^B \equiv -\ln Z_{GK}^B/(\beta N) = \mathcal{F}_{GK}^B/N$ das auf ein einzelnes Teilchen bezogene großkanonische Potential ist. Der Realteil von dem in (3.156) verwendeten Parameter μ stellt das übliche chemische Potential dar, und die Integration über dessen Imaginärteil repräsentiert die Diracsche Delta-Funktion, die für die Einschränkung der Teilchenzahl auf den Wert N sorgt. Die beiden Darstellungen (3.155) und (3.156) sind noch exakt, lassen sich aber auch in der Stationärphasen-Näherung behandeln.

Der Grundgedanke der besagten Näherung basiert auf der Tatsache, dass für große N -Werte der Ausdruck in der eckigen Klammer in (3.156) nicht sehr weit von seinem Minimum abweichen darf, denn sonst wäre der Integrand stark unterdrückt. Die Minimalstelle für den Integralparameter μ (Sattelpunkt) wird weiterhin mit $\bar{\mu}$ bezeichnet und ergibt sich aus der Bedingung

$$0 = 1 + \left. \frac{\partial f_{GK}^B(\beta, \mu)}{\partial \mu} \right|_{\mu=\bar{\mu}} = 1 - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{e^{\beta(E_{\mathbf{k}} - \bar{\mu})} - 1} . \quad (3.157)$$

Die letzte Gleichung lesen wir unmittelbar aus der Spektral-Darstellung für das großkanonische Potential (2.82) ab. Daraus erkennen wir die Gleichung (2.84) für die mittlere Teilchenzahl im großkanonischen Ensemble wieder, womit $\bar{\mu}$ eindeutig als das reelwertige chemische Potential identifiziert ist. Die Gleichung (3.156) lässt sich dann nach der Sattelpunkt-Approximation als

$$Z_N^B(\beta) = \frac{\beta}{2\pi i} \exp \left\{ -\beta N [\bar{\mu} + f_{GK}^B(\beta, \bar{\mu})] \right\} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} d\mu \exp \left\{ -\frac{\beta N}{2} \left. \frac{\partial^2 f_{GK}^B(\beta, \mu)}{\partial \mu^2} \right|_{\mu=\bar{\mu}} (\mu - \bar{\mu})^2 \right\} \\ \times \exp \left\{ -\frac{\beta N}{6} \left. \frac{\partial^3 f_{GK}^B(\beta, \mu)}{\partial \mu^3} \right|_{\mu=\bar{\mu}} (\mu - \bar{\mu})^3 - \frac{\beta N}{24} \left. \frac{\partial^4 f_{GK}^B(\beta, \mu)}{\partial \mu^4} \right|_{\mu=\bar{\mu}} (\mu - \bar{\mu})^4 + \dots \right\} \quad (3.158)$$

schreiben. Der erste Exponentialterm entspricht gerade der großkanonischen Zustandssumme dividiert durch die N -te Potenz der Fugazität $e^{\beta\bar{\mu}}$. Die restlichen Integralterme sorgen für die gesuchte Abweichung der kanonischen Zustandssumme von diesem Resultat. Des Weiteren behandeln wir

das Integral in der Gaussischen Näherung, wonach alle Terme ab der dritten Ordnung in den Fluktuationen $\mu - \bar{\mu}$ störungstheoretisch zu behandeln sind. Mit der Parametrisierung $\mu = c + i\lambda$, wobei nun $c = \bar{\mu}$ ist, erhalten wir ferner

$$Z_N^B(\beta) = e^{-\beta\bar{\mu}N} Z_{GK}^B(\beta, \bar{\mu}) \frac{\beta}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \exp \left\{ -\frac{\beta N}{2} \frac{\partial^2 f_{GK}^B(\beta, \bar{\mu} + i\lambda)}{\partial \lambda^2} \Big|_{\lambda=0} \lambda^2 \right\} \\ \times \left\{ 1 - \frac{\beta N}{24} \frac{\partial^4 f_{GK}^B(\beta, \bar{\mu} + i\lambda)}{\partial \lambda^4} \Big|_{\lambda=0} \lambda^4 + \mathcal{O}(\lambda^6) \right\}, \quad (3.159)$$

wobei hier noch der Term der Ordnung λ^3 aus Symmetriegründen weggelassen wurde. Nun berechnen wir die ersten zwei darin vorkommenden λ -Integrale explizit. Für den ersten ergibt sich unter Berücksichtigung des großkanonischen Potentials (2.82)

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \exp \left\{ -\frac{\beta N}{2} \frac{\partial^2 f_{GK}^B(\beta, \bar{\mu} + i\lambda)}{\partial \lambda^2} \Big|_{\lambda=0} \lambda^2 \right\} = \frac{\sqrt{2\pi}}{\beta} \left\{ \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \bar{\mu}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{e^{\beta(E_{\mathbf{k}} - \bar{\mu})} - 1} \right\}^{-1/2}. \quad (3.160)$$

Analog dazu erhalten wir für den zweiten Term

$$\frac{\beta N}{24} \frac{\partial^4 f_{GK}^B(\beta, \bar{\mu} + i\lambda)}{\partial \lambda^4} \Big|_{\lambda=0} \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \lambda^4 \exp \left\{ -\frac{\beta N}{2} \frac{\partial^2 f_{GK}^B(\beta, \bar{\mu} + i\lambda)}{\partial \lambda^2} \Big|_{\lambda=0} \lambda^2 \right\} \\ = \frac{\sqrt{2\pi}}{8\beta} \left\{ \frac{1}{\beta^3} \frac{\partial^3}{\partial \bar{\mu}^3} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{e^{\beta(E_{\mathbf{k}} - \bar{\mu})} - 1} \right\} \left\{ \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \bar{\mu}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{e^{\beta(E_{\mathbf{k}} - \bar{\mu})} - 1} \right\}^{-5/2}. \quad (3.161)$$

Nun wollen wir die Größen-Verhältnisse in den beiden Entwicklungstermen für genügend große Teilchenzahlen N angeben. Dabei wollen wir nicht auf die Details der Rechnung eingehen und bemerken nur, dass sie in Analogie zu den semiklassischen Untersuchungen in den Abschnitten 2.3.2 für die harmonische Falle und 2.4.1 für den Kastenpotential durchgeführt werden kann. Die daraus resultierenden Größen-Verhältnisse in verschiedenen Temperaturbereichen lauten

$$\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \bar{\mu}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{e^{\beta(E_{\mathbf{k}} - \bar{\mu})} - 1} \sim \begin{cases} N & , T > T_c \\ N^{4/3} & , T \approx T_c \\ N^2 & , T < T_c \end{cases} \quad \text{im Kasten und} \quad \sim \begin{cases} N & , T > T_c \\ N & , T \approx T_c \\ N^2 & , T < T_c \end{cases} \quad \text{für Falle,} \quad (3.162)$$

$$\frac{1}{\beta^3} \frac{\partial^3}{\partial \bar{\mu}^3} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{e^{\beta(E_{\mathbf{k}} - \bar{\mu})} - 1} \sim \begin{cases} N & , T > T_c \\ N^{8/3} & , T \approx T_c \\ N^4 & , T < T_c \end{cases} \quad \text{im Kasten und} \quad \sim \begin{cases} N & , T > T_c \\ N^2 & , T \approx T_c \\ N^4 & , T < T_c \end{cases} \quad \text{für Falle.}$$

Aus diesen Abschätzungen erkennen wir, dass die störungstheoretische Reihenentwicklung in (3.159) nur dann sinnvoll ist, wenn die Temperatur T höher als der kritische Wert T_c ist. Denn nur dann dominiert der λ^0 -Term (3.160) gegenüber dem λ^4 -Term (3.161) und allen weiteren Summanden. Bei Temperaturen um den kritischen Punkt ist dagegen der λ^0 -Term von derselben Größenordnung $\mathcal{O}(N^{-2/3})$ für den Kastenpotential und $\mathcal{O}(N^{-1/2})$ für die harmonische Falle wie der nachfolgende λ^4 -Term. Weiterhin kann man noch zeigen, dass auch der λ^6 -Term von derselben

Größenordnung ist. Analog ist die Situation unterhalb der kritischen Temperatur, wo alle Terme zu der Ordnung $\mathcal{O}(N^{-1})$ beitragen, unabhängig davon, ob es sich um Falle oder Kastenpotential handelt. Daher ist die Sattelpunkt-Approximation im Temperaturbereich um den kritischen Punkt und unterhalb in ihrer störungstheoretischen Form (3.159) nicht gerechtfertigt. Wie wir bereits oben erwähnten, ist dieser Umstand in der Literatur wohl bekannt und wurde z.B. in dem Textbuch [86, Kapitel 11] diskutiert (siehe auch [64,88]). Die Ursache für diesen Sachverhalt bei der Entwicklung der großkanonischen Zustandssumme ist mit dem Problem der anomalen makroskopischen Teilchenzahl-Fluktuationen innerhalb der großkanonischen Ensemble-Theorie verwandt, welches wir schon im Abschnitt 2.6 diskutierten.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die in (3.159) auftretende Reihe bereits in der führenden nichttrivialen Ordnung der Sattelpunktsentwicklung resummiert werden muss. Dieses Problem ist allerdings ungleich viel schwieriger als z.B. die Resummation im Abschnitt 2.4.1, die wir zur Berechnung der Verschiebung der kritischen Temperatur im Kastenpotential angewandt haben. Diese letzte Resummation betraf nämlich nur die führende Ordnung in der Sattelpunkt-Approximation. Nun müssten wir auch die Korrekturen dazu in allen Ordnungen durch eine ähnliche Resummation bestimmen. Dieses Vorhaben ist somit schon aus prinzipiellen Gründen nicht zu bewältigen. Eine wichtige Lehre können wir dennoch aus den Überlegungen dieses Abschnitts ziehen. Diese lautet nämlich, dass die kanonische Zustandssumme insbesondere im Bose-Einstein-kondensierten Bereich nicht als eine triviale Abwandlung des großkanonischen Resultats angesehen werden kann. Weitere Indizien, die ebenfalls dafür sprechen, werden im anschließenden Abschnitt angeführt.

3.4 Fluktuationen und Teilchenzahl-Statistik

Zum Abschluss des letzten Kapitels haben wir im Abschnitt 2.6 auf die Probleme der großkanonischen Ensemble-Theorie mit den mittleren quadratischen Fluktuationen der Teilchenzahl im Grundzustand hingewiesen. Untersuchungen der Größe dieser Fluktuation haben zum unsinnigen Resultat geführt, dass sie proportional mit der Teilchenzahl anwachsen und somit makroskopisch groß sind, sobald man sich unterhalb der kritischen Temperatur befindet. Dieser Umstand ist insbesondere bei verschwindenden Temperaturen unhaltbar, da doch gerade dort keine thermischen Fluktuationen zu erwarten sind. Ebenfalls im Abschnitt 2.6 haben wir auf die Arbeiten [64,69] verwiesen, in denen ein Weg vorgezeichnet war, das Problem der unphysikalischen Fluktuationen zu umgehen. In diesen Vorschlag musste die Gesamtteilchenzahl festgehalten werden, so dass kein freier Austausch mit dem Teilchenreservoir stattfinden konnte. Die einzige Quelle für die Fluktuationen der Teilchenzahl im Grundzustand wäre demnach der Austausch der Grundzustand-Teilchen mit denjenigen in angeregten Zuständen. Solche Fluktuationen stellten sich aber als normal (mikroskopisch) heraus und waren für tiefere Temperaturen unterdrückt. Die Forderung nach einem System mit fixierter Teilchenzahl ist in einem kanonischen Ensemble per Konstruktion erfüllt, so dass wir hier keine anomal großen Fluktuationen erwarten. Das Ziel dieses Abschnitts ist es nun, diese Erwartungen zu bestätigen. Damit soll die Diskrepanz zwischen den kanonischen und großkanonischen Ensemble-Theorien anhand der Fluktuationsstärke explizit

aufgezeigt werden. Bei Untersuchungen der vollen Teilchenzahl-Statistik im Grundzustand stellen wir ebenfalls einen grundsätzlichen Unterschied zwischen den beiden Ensemble-Theorien fest.

Zur Berechnung quadratischer Teilchenzahl-Fluktuationen im Grundzustand benötigen wir zunächst die Mittelwerte für die Teilchenzahl und deren Quadrat in der kanonischen Ensemble-Theorie. Den Mittelwert der ersten Größe kennen wir bereits aus der Gleichung (3.81), die wir im Abschnitt 3.1.4 hergeleitet haben. Eine analoge Rechnung lässt sich auch für den Quadrat-Mittelwert durchführen, den wir nach

$$\langle N_G^2 \rangle_N^B \equiv \frac{F_N^B(\beta)}{Z_N^B(\beta)} \quad (3.163)$$

definieren. Die Größe F_N^B steht dabei für das statistische Gewicht des Teilchenzahl-Quadrats im Grundzustand, der in der Zyklus-Darstellung in Analogie zu (3.70) als

$$F_N^B = \sum_{C_1, \dots, C_N}^{(\sum n C_n = N)} \sum_{m_1=0}^{C_1} \dots \sum_{m_N=0}^{C_N} \left(\sum_{n=1}^N n m_n \right)^2 \gamma_1^{\sum_{n=1}^N n m_n} \prod_{n=1}^N \frac{\xi_n^{C_n - m_n}}{n^{C_n} m_n! (C_n - m_n)!} \quad (3.164)$$

geschrieben werden kann. Für die weiteren Berechnungen dieser Größe erweist sich die folgende direkt verifizierbare Umformungsregel

$$\left(\sum_{n=1}^N n m_n \right)^2 \gamma_1^{\sum_{n=1}^N n m_n} = \gamma_1 \frac{\partial}{\partial \gamma_1} \left[\gamma_1 \frac{\partial}{\partial \gamma_1} \gamma_1^{\sum_{n=1}^N n m_n} \right] \quad (3.165)$$

als hilfreich. Damit ergibt sich für die Gewichtungsfunktion (3.164) die zu (3.73) ähnliche Beziehung

$$F_N^B = \gamma_1 \frac{\partial}{\partial \gamma_1} \left[\gamma_1 \frac{\partial}{\partial \gamma_1} Z_N^B \right]. \quad (3.166)$$

Alle weiteren Berechnungen können in Analogie zur Vorgehensweise im Abschnitt 3.1.4 gestaltet werden und führen zum Endergebnis für das Gewicht der quadratischen Teilchenzahl im Grundzustand

$$F_N^B(\beta) = \sum_{n=1}^N (2n-1) \gamma_1^n(\beta) Z_{N-n}^B(\beta). \quad (3.167)$$

Damit lässt sich nach (3.163) der Quadrat-Mittelwert der Grundzustand-Teilchenzahl bestimmen. Zusammen mit dem Mittelwert aus (3.81) ergibt sich daraus die mittlere quadratische Fluktuation im Grundzustand $\langle (\Delta N_G)^2 \rangle_N^B \equiv \langle N_G^2 \rangle_N^B - [\langle N_G \rangle_N^B]^2$ zu

$$\langle (\Delta N_G)^2 \rangle_N^B = \sum_{n=1}^N (2n-1) \gamma_1^n(\beta) \frac{Z_{N-n}^B(\beta)}{Z_N^B(\beta)} - \left[\sum_{n=1}^N \gamma_1^n(\beta) \frac{Z_{N-n}^B(\beta)}{Z_N^B(\beta)} \right]^2. \quad (3.168)$$

Dieser Ausdruck wird nun für den Spezialfall des harmonischen Potentials ausgewertet und ergibt die in Abb. 3.12 dargestellten durchgezogenen Kurven. In Abb. 3.12 a) werden sie zusammen mit den entsprechenden großkanonischen Resultaten verglichen (gestrichelte Kurven), die wir

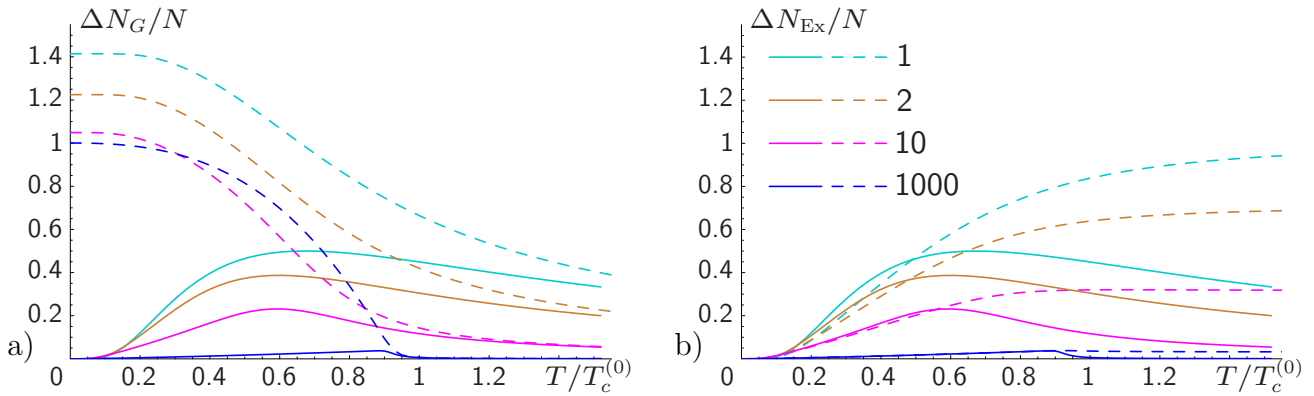


Abbildung 3.12: a) Mittlere Fluktuation der Teilchenzahl im Grundzustand bezogen auf ein einziges Teilchen im harmonischen Fallenpotential. Durchgezogene Kurven sind Resultate in kanonischen Ensembles aus $N = 1, 2, 10$ und 1000 Teilchen nach (3.168). Ergebnisse der entsprechenden großkanonischen Ensembles aus Abb. 2.13 a) sind durch gestrichelte Kurven dargestellt. b) Wie in a), jedoch für Fluktuationen aller angeregten Teilchen.

aus Abb. 2.13 a) entnehmen können. Der Unterschied ist insbesondere im Tieftemperaturbereich auffällig. Die Resultate im kanonischen Ensemble konvergieren auch mit steigenden Teilchenzahlen nicht gegen diejenige der großkanonischen Ensemble-Theorie. Während die großkanonischen Teilchenzahl-Fluktuationen, bezogen auf ein einzelnes Teilchen, unterhalb der kritischen Temperatur immer einen endlichen Wert aufweisen, werden sie im kanonischen Ensemble mit wachsender Teilchenzahl immer stärker unterdrückt. Aber genau dieser Sachverhalt wurde von uns erwartet oder sogar geradezu erwünscht, wie am Ende des Abschnitts 2.6 und am Anfang dieses Abschnitts erörtert wurde. Während das Verhalten im großkanonischen Ensemble derart anomal ausgefallen ist, schien die kanonische Ensemble-Theorie schon im Vorfeld dazu berufen zu sein, das geeignetere Bild zu liefern. Durch Abb. 3.12 a) werden diese Erwartungen lediglich bestätigt.

Und wie sieht die Situation mit den Fluktuationen ΔN_{Ex} der Teilchenzahl in angeregten Zuständen N_{Ex} aus? In der großkanonischen Ensemble-Theorie hatte sich bereits herausgestellt, dass solche Fluktuationen am Temperaturnullpunkt verschwinden und für alle anderen Temperaturen mit ansteigenden Teilchenzahlen N unterdrückt sind. So ergaben sich aus der Bose-Einstein-Verteilung z.B. im Hochtemperaturbereich konstante Werte, die mit der Teilchenzahl wie $\Delta N_{Ex} \approx N^{-1/2}$ skalierten. Um Verhältnisse im gesamten Temperaturbereich zu verdeutlichen, sind einige der großkanonischen Resultate in Abb. 3.12 b) durch die gestrichelten Kurven dargestellt. Für kanonische Ensembles ergeben sich die Fluktuationen der angeregten Teilchen hingegen aufgrund der Beziehung $N = N_G + N_{Ex}$ unmittelbar nach der exakten Gleichung $\langle \Delta N_{Ex} \rangle_N^B = \langle \Delta N_G \rangle_N^B$. Demnach kennen wir die Beiträge solcher Fluktuationen bereits aus (3.168) und können somit die Kurvenverläufe aus Abb. 3.12 a) direkt übernehmen. Ein Vergleich zwischen den beiden Ensemble-Theorien in Abb. 3.12 b) zeigt nun folgendes. Die Resultate in beiden Ensembles verschwinden im thermodynamischen Limes gleichermaßen, wodurch man nicht von einer gravierenden Diskrepanz sprechen kann. Dennoch fallen die Unterschiede überraschend deutlich aus. Während die Ergebnisse nach der großkanonischen Bose-Einstein-Verteilung für hohe Temperaturen wie bereits erwähnt gegen die konstanten Werte tendieren, verschwinden sie nach exakten kanonischen Rechnungen in

diesem Temperaturbereich schon für feste Teilchenzahlen. Weiterhin gibt es für kanonische Resultate einen Temperaturbereich, in dem solche Fluktuationen maximal werden. In entsprechenden großkanonischen Bildern sind derartige Strukturen hingegen nicht auszumachen.

An dieser Stelle fassen wir nochmals die bereits gefundenen statistischen Eigenschaften des Grundzustandes zusammen und beschränken uns dabei auf den Spezialfall des harmonischen Potentials. Im Abschnitt 3.2.3 haben wir festgestellt, dass die mittlere Teilchenzahl im Grundzustand in den beiden Ensembles, dem kanonischen und dem großkanonischen, identisch sind. Das heißt im thermodynamischen Limes ergaben beide Ensemble-Theorien dasselbe Bild für den besagten Mittelwert. Die zweite Kummulante der Teilchenzahl-Verteilung im Grundzustand wird durch die mittlere Fluktuation repräsentiert, welche den Gegenstand der obigen Diskussion in diesem Abschnitt war. Wie wir deutlich sehen konnten, ergaben sich diese Fluktuationen in den beiden Ensembles als völlig verschieden. Selbst im thermodynamischen Limes bleibt die Diskrepanz bestehen, sobald die Temperatur ihren kritischen Wert unterschreitet und die Kondensat-Fraktion makroskopisch wird. Und wie sieht es mit höheren Kummulanten der Teilchenzahl-Verteilung aus, bleibt die zweite Kummulante eine Ausnahme oder zeigen alle höheren Kummulanten eine ähnliche Diskrepanz? Die Untersuchungen von Ziff et al. ergeben weitere Diskrepanzen im Bose-Einstein-kondensierten Bereich [64]. An dieser Stelle wollen wir diese Überlegungen nicht weiter ausführen und widmen uns stattdessen noch kurz dem Problem der vollen Teilchenzahl-Statistik im Grundzustand, um zu sehen, worin sich die Unterschiede zwischen den kanonischen und großkanonischen Ensembles äußern.

Für dieses Vorhaben berechnet man die Wahrscheinlichkeiten $p(K|N; \beta)$, bei einer festen Temperatur (festes β) K von insgesamt N Teilchen im Grundzustand zu finden. Diese Größe wurde in den Arbeiten von Weiss und Wilkens [89–91] im großkanonischen, kanonischen und mikrokanonischen Ensembles berechnet. Wir konzentrieren uns hier auf die kanonischen und großkanonischen Berechnungen und skizzieren kurz die wichtigsten Ideen. Als Ausgangspunkt dient uns die N -Teilchen-Zustandssumme nach der Zyklus-Darstellung in (3.67). Unsere Aufgabe besteht nun darin, diejenigen Zyklus-Kombinationen herauszuprojezieren, in denen sich genau K Teilchen im Grundzustand befinden. Da diese Zahl gerade der Potenz des Grundzustands-Beitrags γ_1 entspricht, nämlich $\sum_{n=1}^N nm_n$, ergibt sich für den Anteil der Zustandssumme, bei dem K Teilchen im Grundzustand zu finden sind, oder kurz das K -Teilchen-Gewicht, der Ausdruck

$$P(K|N; \beta) = \sum_{C_1, \dots, C_N}^{(\sum nC_n=N)} \sum_{m_1=0}^{C_1} \dots \sum_{m_N=0}^{C_N} \delta_{K, \sum nm_n} [\gamma_1(\beta)]^{\sum nm_n} \prod_{n=1}^N \frac{\xi_n^{C_n - m_n}}{n^{C_n} m_n! (C_n - m_n)!} . \quad (3.169)$$

Das entsprechende großkanonische Gewicht der Konfigurationen mit K Teilchen im Grundzustand ergibt sich mit der Fugazität $z = e^{\beta\mu}$ nach

$$P_{GK}(K; \beta, z) \equiv \sum_{N=0}^{\infty} P(K|N; \beta) z^N \quad (3.170)$$

und ist gleichzeitig die Erzeugende für die kanonischen Gewichte (3.169). Für die weiteren Berech-

nungen verwenden wir noch die zu (3.60) analoge Umformungsregel

$$\delta_{K, \sum nm_n} \gamma_1^{\sum nm_n} = \gamma_1^K \left[\frac{1}{K!} \frac{\partial^K}{\partial \gamma_1^K} \gamma_1^{\sum nm_n} \right]_{\gamma_1=0} \quad (3.171)$$

und erhalten für das Gewicht (3.170) mit Hilfe der Erzeugenden $Z_{GK}(\beta, z)$ aus (3.50)

$$P_{GK}(K; \beta, z) = \gamma_1^K(\beta) \left[\frac{1}{K!} \frac{\partial^K}{\partial \gamma_1^K} Z_{GK}^B(\beta, z) \right]_{\gamma_1=0} . \quad (3.172)$$

Für die großkanonische Zustandssumme verwenden wir weiterhin die Form (3.76) für den bosonischen Fall und führen die Summation über den Grundzustand-Anteil explizit aus, so dass

$$Z_{GK}^B(\beta, z) = \frac{1}{1 - \gamma_1(\beta) z} \exp \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \xi_n(\beta) \frac{z^n}{n} \right\} \quad (3.173)$$

gilt. Mit dieser Form ergibt sich nach (3.172)

$$P_{GK}(K; \beta, z) = \gamma_1^K(\beta) z^K \exp \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \xi_n(\beta) \frac{z^n}{n} \right\} = \gamma_1^K(\beta) z^K [1 - \gamma_1(\beta) z] Z_{GK}^B(\beta, z) . \quad (3.174)$$

Für die großkanonische Wahrscheinlichkeit $p_{GK}(K; \beta, z) = P_{GK}(K; \beta, z) / Z_{GK}^B(\beta, z)$, K Teilchen im Grundzustand zu finden, verwenden wir nun die Beziehung $\gamma_1(\beta) z = e^{\beta \hat{\mu}}$, wobei $\hat{\mu} = \mu - E_G$ das um die Grundzustands-Energie reduzierte chemische Potential darstellt. Damit erhalten wir weiterhin

$$p_{GK}(K; \beta, z) = e^{K\beta \hat{\mu}} [1 - e^{\beta \hat{\mu}}] . \quad (3.175)$$

Diese Wahrscheinlichkeit lässt sich nun z.B. für das harmonische Potential innerhalb eines großkanonischen Ensembles mit der mittleren Teilchenzahl N auswerten, wobei für diesen Fall das chemische Potential $\hat{\mu}$ aus der Teilchenzahlgleichung (2.168) zu bestimmen ist. Einige Resultate dieser Rechnung sind in Abb. 3.13 durch gestrichelte Kurven dargestellt.

Nun benutzen wir noch die Gleichung (3.174), um damit aus (3.170) die N -Teilchen-Komponenten herauszuprojezieren. Die Berechnungen dazu gehen in völliger Analogie zu denjenigen im Abschnitt 3.1.3 und werden daher weggelassen. Zu bemerken ist hierfür nur, dass sich die Gewichte nach einer weiteren Rekursionsbeziehung ergeben, welche lautet [90]

$$P(K|N; \beta) = \begin{cases} 0 & , K > N \\ \gamma_1^N(\beta) & , K = N \\ \gamma_1^K(\beta) Z_{N-K}^B(\beta) - \gamma_1^{K+1}(\beta) Z_{N-K-1}^B(\beta) & , K < N . \end{cases} \quad (3.176)$$

Die gesuchte Wahrscheinlichkeit, K von insgesamt N Teilchen im Grundzustand zu finden, ergibt sich nun daraus nach der Gleichung

$$p(K|N; \beta) = \frac{P(K|N; \beta)}{Z_N^B(\beta)} . \quad (3.177)$$

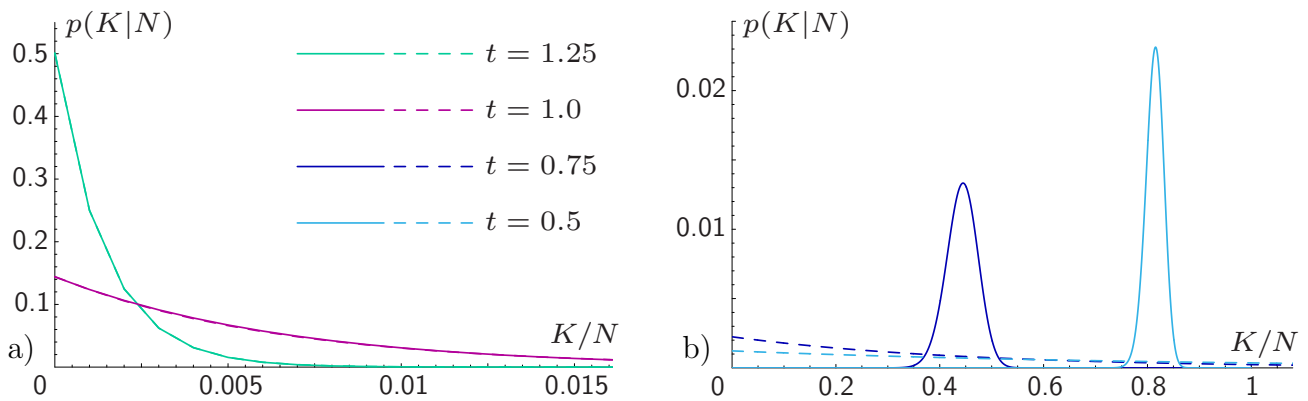


Abbildung 3.13: Wahrscheinlichkeiten, K von N Teilchen im Grundzustand der harmonischen Falle zu finden für kanonischen (durchgezogene Kurven) sowie großkanonischen (gestrichelte Kurven) Ensembles aus $N = 1000$ Teilchen. a) Für Temperaturen $t = T/T_c^{(0)} = 1.25$ und $t = 1.0$ oberhalb der kritischen Temperatur. b) Für Temperaturen $t = 0.75$ und $t = 0.5$ unterhalb der kritischen Temperatur.

Diese Größe lässt sich z.B. für das harmonische Potential mit dem Beitrag des Grundzustandes $\gamma_1(\beta)$ aus (3.149) und den kanonischen Zustandssummen aus der Rekursion (3.151) auswerten. Einige Resultate sind in Abb. 3.13) graphisch mit Hilfe der durchgezogener Kurven dargestellt.

Aus Abb. 3.13 a) sieht man schon für $N = 1000$ Teilchen eine komplette Übereinstimmung der kanonischen und großkanonischen Teilchenzahl-Statistiken im Grundzustand oberhalb der kritischen Temperatur. Dabei erinnern wir uns daran, dass sowohl $t = T/T_c^{(0)} = 1.25$ als auch $t = 1.0$ für $N = 1000$ Teilchen noch über dem quasikritischen Temperaturwert von etwa $t_c \approx 0.92$ liegen. Hier sehen wir noch, dass in diesem Bereich die Kurvenverläufe bei tieferen Temperaturen immer flacher werden, d.h. immer mehr Teilchen wird es möglich, den Grundzustand zu besetzen. Daraus resultiert aber auch, dass die Fluktuationen um die mittlere Grundzustand-Besetzung immer stärker werden. Der wohl wichtigste Unterschied der beiden Statistiken besteht in diesem Temperaturbereich darin, dass in großkanonischen Ensembles im Gegensatz zu kanonischen Gesamtheiten auch Grundzustand-Besetzungen mit Teilchenzahlen K größer als die mittlere Gesamtteilchenzahl N möglich sind. Das sieht man schon aus dem Vergleich der Wahrscheinlichkeit (3.175) ohne explizite Einschränkung der Zahl K und dem kanonischen Resultat (3.176), wonach die Wahrscheinlichkeiten für $K > N$ explizit verschwinden. Das ist noch kein Problem des großkanonischen Ensembles an sich, sondern hat lediglich zur Folge, dass die Fluktuationen in diesem Ensemble etwas größer ausfallen als im kanonischen. Doch diese Unterschiede schlagen selbst bei einer so kleinen Teilchenzahl wie $N = 1000$ noch kaum zu Buche und tun das bei größeren Teilchenzahlen umso weniger.

Unterhalb der kritischen Temperatur ändert sich die Situation jedoch dramatisch, wie aus Abb. 3.13 b) ersichtlich. Hier setzt sich in der großkanonischen Ensemble-Theorie der Trend fort, dass mit sinkenden Temperaturen die Kurvenverläufe für Besetzungszahl-Statistiken immer flacher und konstanter werden. Doch im kanonischen Ensemble sieht man etwas anderes. Hier bilden sich scharf abgegrenzte Strukturen ähnlich den Gauss-Verteilungen. Diese verschieben sich mit

fallenden Temperaturen in Richtung größerer Besetzungszahlen K und werden immer enger und höher. Die Verschiebung zu größeren K -Werten ist der Ausdruck höherer mittleren Grundzustand-Besetzung, die schärfer abgegrenzten Strukturen bedeuten gleichzeitig geringere Fluktuationen (siehe dazu Abb. 3.12). Am absoluten Temperaturnullpunkt ist dann weiterhin zu erwarten, dass die Besetzungszahl-Statistik einen einzigen Peak bei $K = N$ aufweist. Eine solche Vorstellung ist mit der großkanonischen Ensemble-Theorie und der Verteilung (3.175) darin offensichtlich nicht vereinbar. Dieser Umstand stellt eine Verallgemeinerung der Beobachtung dar, dass die Fluktuationen im großkanonischen Ensemble unterhalb einer bestimmten Temperatur ebenfalls stark von den kanonischen Werten abweichen, wie in Abb. 3.12 a) auch deutlich zu sehen ist.

Mit dieser Feststellung wollen wir noch den Anwendungsbereich der kanonischen und großkanonischen Ensemble-Theorie diskutieren. Die letztere der beiden zeigt Fluktuationen der Teilchenzahl im Grundzustand, die gerade im interessanten Bose-Einstein-kondensierten Bereich unphysikalisch anomal sind. Das hat zwar keinen Einfluss auf die mittleren Besetzungszahlen, womit die großkanonische Bose-Einstein-Verteilung unter Umständen auch ihre Berechtigung hat, zumal sich die Rechnungen damit recht einfach gestalten lassen. Aber die volle Besetzungszahl-Statistik wird in der großkanonischen Ensemble-Theorie komplett falsch wiedergegeben. Das sieht in der kanonischen Ensemble-Theorie schon ganz anders aus. Hier stimmen die Mittelwerte der Grundzustand-Besetzung mit den großkanonischen gut überein, aber auch die Fluktuationen sind darin auf das physikalisch sinnvolle Maß beschränkt. Dadurch scheint auch die scharf strukturierte Besetzungszahl-Statistik im kondensierten Bereich glaubwürdig zu sein. Doch wie weit gilt diese Feststellung für ein komplett abgeschlossenes System, welches in Experimenten mit in Fallen eingeschlossenen Bose-Gasen weitestgehend vorliegt?

Ein ideal gegenüber dem Energie- und Teilchen-Austausch abgeschlossenes System wird unmittelbar in der mikrokanonischen Ensemble-Theorie behandelt. In der Arbeit [90] wurde die Besetzungszahl-Statistik in einem mikrokanonischen Ensemble aus $N = 200$ Teilchen studiert und mit dem entsprechenden Ergebnis der kanonischen Ensemble-Theorie verglichen. Dabei hatte sich gezeigt, dass die mikrokanonischen Ergebnisse noch etwas schärfere Strukturen aufweisen als die kanonischen, jedoch ohne sich qualitativ stark zu unterscheiden. Der Vergleich der Teilchenzahl-Fluktuationen im Grundzustand zeigt ebenfalls ein analoges Verhalten in beiden Ensembles, wie in den Arbeiten [87,89,92] auch bestätigt wurde. Die quantitativen Unterschiede werden mit steigender Teilchenzahl unterdrückt und verschwinden im thermodynamischen Limes, so wie die Fluktuationen auch schon an sich verschwinden. Allerdings wurde in den Arbeiten [93,94] im dreidimensionalen harmonischen Oszillator festgestellt, dass das Verschwinden des Unterschieds zwischen den beiden Ensemble-Theorien und das Verschwinden der Teilchenzahl-Fluktuation gleich schnell sind. Das bedeutet, dass letztere sich um einen nahezu konstanten Faktor unterscheiden, wie groß die Teilchenzahl auch immer ist. An dieser Stelle sei dennoch angemerkt, dass dieser Umstand noch keinen Grund darstellt, von einer Nichtäquivalenz der kanonischen und mikrokanonischen Ensembles zu sprechen. Lediglich das Erreichen des thermodynamischen Limes geschieht unterschiedlich schnell.

Erinnern wir uns an dieser Stelle noch an das grundsätzliche Problem in der großkanonischen Ensemble-Theorie bezüglich der Fluktuationen der Gesamtteilchenzahl. Der Grund dafür war ein

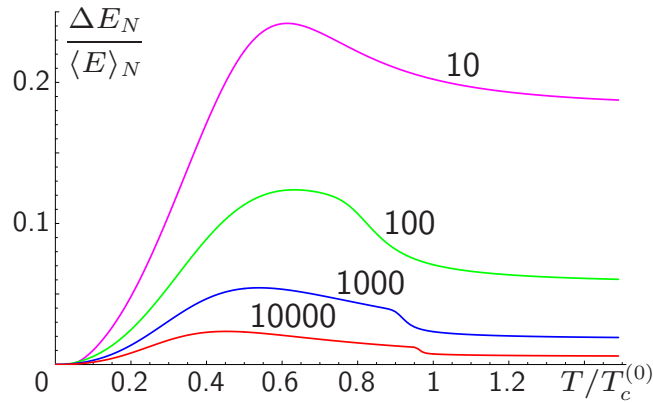


Abbildung 3.14: Mittlere Energiefluktuationen bezogen auf den Energiemittelwert in einer harmonischen isotropen Falle für kanonische Ensembles aus $N = 10, 100, 1000$ und 10000 Teilchen.

offener Teilchenaustausch des Systems mit seiner Umgebung. Ein kanonisches System ist hingegen gegenüber solchen Austauschprozessen abgeschlossen und weist daher keine Anomalien in der Teilchenzahl-Fluktuation auf. Wie wir aus dem oben Besprochenen sehen konnten, ist das auch ein mit den mikrokanonischen Ergebnissen verträglicher Befund. Und wie sieht es mit den Energiefluktuationen in den kanonischen Ensembles aus? Da letzteres sich in einem offenen Energieaustausch mit seiner Umgebung befindet, besteht da nicht die Möglichkeit anomaler Fluktuationen der Gesamtenergie? Die Antwort auf diese Frage ist zum Glück negativ, und zwar aus folgenden Gründen. Die mittlere quadratische Energiefluktuation $(\Delta E)_N^2 \equiv \langle E^2 \rangle_N - \langle E \rangle_N^2$ lässt sich in einem kanonischen Ensemble aus N Bosonen mit Hilfe der Wärmekapazität C_N^B nach der Beziehung

$$(\Delta E)_N^2 = k_B T^2 C_N^B \quad (3.178)$$

darstellen. Für die weiteren Untersuchungen müssen wir den Bezug dieser Größe zur mittleren Energie finden, die wir nach der Gleichung

$$\langle E \rangle_N = k_B T^2 \frac{\partial}{\partial T} \ln Z_N^B \quad (3.179)$$

mit der kanonischen Zustandssumme Z_N^B erhalten. Des Weiteren bleibt nur noch festzustellen, ob die spezifische relative Fluktuationsstärke $\Delta E_N / \langle E \rangle_N$ anomal makroskopisch oder doch mit der Teilchenzahl N unterdrückt ist. Letzteres ist aus allgemein verständlichen Gründen der Fall, denn wie wir wissen, sind sowohl Wärmekapazität C_N^B als auch die mittlere Energie $\langle E \rangle_N$ extensive Größen, d.h. proportional zur Teilchenzahl N . Aus dieser Überlegung folgt die Abschätzung $\Delta E_N / \langle E \rangle_N \sim N^{-1/2}$ und somit das Verschwinden im thermodynamischen Limes.

Die detaillierteren Angaben der relativen Stärke der Energiefluktuationen hängen vom Fallenpotential ab. So ergeben sich z.B. im isotropen harmonischen Potential mit der kanonischen Zustandssumme aus (3.151) Kurvenverläufe, die in Abb. 3.14 dargestellt sind. Wie man daraus sieht, verschwinden in der Tat die relativen Energiefluktuationen innerhalb der kanonischen Ensemble-Theorie im thermodynamischen Limes, so wie die schon zuvor beschriebenen Teilchenzahl-Fluktuationen. Das sorgt nun dafür, dass beide Ensembles, das kanonische und das mikrokanonische,

zueinander äquivalent sind. Aus diesem Grund können wir getrost auf die Untersuchungen abgeschlossener Systeme innerhalb der mikrokanonischen Ensemble-Theorie verzichten. Damit stellen wir abschließend fest, dass die Beschreibungen der idealen Bose-Gase innerhalb der kanonischen Ensembles auch für völlig abgeschlossene Systemen ausreichend sind und keine inneren Widersprüche aufweisen.