

5. Eigenschaften des Kondensats in einem
wechselwirkenden Bosegas für $T \ll T_c$:
Gross-Pitaevski Gleichung

Im Gegensatz zum nicht wechselwirkenden Bosegas kann
der Grundzustand von

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \int d^3\vec{r} \, \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right] \hat{\psi}(\vec{r}) \\ (1) \quad & + g \int d^3\vec{r} \, \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}) \end{aligned}$$

nicht exakt bestimmt werden. Wir wollen versuchen
diesen näherungsweise zu berechnen.

Für ein ideales Bosegas ist der Grundzustand gegeben durch

$$(2) \quad |\phi_0\rangle = |N_0, 0, 0, \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_0!}} \hat{a}_0^{+N_0} |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_0!}} \left(\int d\vec{x} \, \varphi_0(\vec{x}) \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}) \right)^{N_0} |0\rangle$$

Für normalgeordnete Ausdrücke findet man damit

$$\begin{aligned} \hat{\psi}(\vec{r}) |\phi_0\rangle &= \sum_n \varphi_n(\vec{r}) \hat{a}_n |\phi_0\rangle \\ (3) \quad &= \sum_n \varphi_n(\vec{r}) \hat{a}_n \frac{1}{\sqrt{N_0!}} \hat{a}_0^{+N_0} |0\rangle \\ &= \varphi_0(\vec{r}) N_0 \frac{1}{\sqrt{N_0!}} \hat{a}_0^{+(N_0-1)} |0\rangle \\ &= \varphi_0(\vec{r}) \sqrt{N_0} |N_0-1, 0, 0, \dots\rangle \end{aligned}$$

analog

$$(4) \quad \langle \phi_0 | \hat{\psi}^+(\vec{r}) = \varphi_0^*(\vec{r}) \sqrt{N_0} \langle N_0-1, 0, 0, \dots |$$

D.h. in Übereinstimmung mit der $U(1)$ Symmetrie von $\hat{H}$ ist

$$(5) \quad \langle \phi_0 | \hat{\psi}(\vec{r}) | \phi_0 \rangle = \langle \phi_0 | \hat{\psi}^+(\vec{r}) | \phi_0 \rangle = 0$$

Dasselbe gilt für alle Korrelationen mit ungleicher Anzahl von Erzeugern und Vernichtern. Außerdem gilt

$$(6) \quad \langle \phi_0 | \hat{\psi}^+(\vec{x}) \hat{\psi}(\vec{y}) | \phi_0 \rangle = \varphi_0^*(\vec{x}) \varphi_0(\vec{y}) N_0$$

$$\langle \phi_0 | \hat{\psi}^+(\vec{x}) \hat{\psi}^+(\vec{y}) \hat{\psi}(\vec{y}) \hat{\psi}(\vec{x}) | \phi_0 \rangle = |\varphi_0(\vec{x})|^2 |\varphi_0(\vec{y})|^2 \cdot N_0(N_0-1)$$

(7)

$$\xrightarrow{N \gg 1} |\varphi_0(\vec{x})|^2 |\varphi_0(\vec{y})|^2 N_0^2$$

Gleichungen (5) bis (7) legen nahe den GZ durch einen kohärenten Zustand zu approximieren mit $\alpha = \sqrt{N_0}$

$$(8) \quad \begin{aligned} |\phi_0\rangle &\longrightarrow e^{i\vartheta} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} e^{-|\alpha|^2/2} |n, 0, 0, \dots\rangle \\ &= e^{i\vartheta} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n e^{-|\alpha|^2/2}}{n!} \frac{1+n}{\alpha_0} |0\rangle \end{aligned}$$

mit

$$\alpha = \sqrt{N_0}$$

und einer gleichmäßig auf dem Intervall $[0, 2\pi]$ verteilten Zufallsphase ϑ über die bei Berechnung von Erwartungswerten zu mitteln ist.

In der Tat findet man

$$(9) \quad \langle \hat{\psi}(\vec{r}) \rangle = \varphi_0(\vec{r}) \sqrt{N_0} e^{i\vartheta} = 0$$

$$(10) \quad \langle \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}) \hat{\psi}(\vec{y}) \rangle = \varphi_0^*(\vec{x}) \varphi_0(\vec{y}) N_0 e^{-i\vartheta} e^{i\vartheta} \\ = \varphi_0^*(\vec{x}) \varphi_0(\vec{y}) N_0$$

$$(11) \quad \langle \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}) \hat{\psi}^\dagger(\vec{y}) \hat{\psi}(\vec{y}) \hat{\psi}(\vec{x}) \rangle = |\varphi_0(\vec{x})|^2 |\varphi_0(\vec{y})|^2 N^2$$

Für Rechnungen ist es vorteilhaft die Zufallsphase festzulegen, z.B. $\vartheta = 0$, d.h.

$$(12) \quad \boxed{|\phi_0\rangle \longrightarrow |\alpha = \sqrt{N_0}, 0, 0, \dots\rangle}$$

Damit wird explizit die U(1) Symmetrie gebrochen.

Außerdem ist der approximative Grundzustand kein Eigenzustand des Teilchenzahloperators mehr, d.h. die Superselektionsregel der nichtrelativistischen Quantenmechanik wird leicht verletzt. Es ist

$$(13) \quad \langle \hat{N} \rangle = N_0 \quad \langle \Delta \hat{N}^2 \rangle = N_0$$

allerdings $\frac{\langle \Delta \hat{N}^2 \rangle}{\langle \hat{N} \rangle^2} = \frac{1}{N_0} \xrightarrow{N \gg \infty} 0$

Gl. (12) entspricht der Ersetzung

$$(14) \quad \hat{\psi}(\vec{r}, t) \rightarrow \varphi_0(\vec{r}, t) \sqrt{N_0}$$

in normalgeordneten Korrelationen. Allgemeiner kann man eine unitäre Transformation auführen

$$(15) \quad |\phi_0\rangle \rightarrow |\bar{\phi}_0\rangle = U |\phi_0\rangle$$

$$\hat{A} \rightarrow \hat{\bar{A}} = U \hat{A} U^{-1}$$

mit

$$(16) \quad U = \exp \left\{ \sqrt{N_0} (\hat{a}_0^\dagger - \hat{a}_0) \right\} \\ = \exp \left\{ \sqrt{N_0} \int d\vec{r} (\varphi_0(\vec{r}) \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) - \varphi_0^*(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r})) \right\}$$

Dies liefert

$$(17) \quad |\phi_0\rangle \rightarrow |\bar{\phi}_0\rangle = |0\rangle$$

$$(18) \quad \hat{\psi}(\vec{x}) \rightarrow \hat{\bar{\psi}}(\vec{x}) = \varphi_0(\vec{x}) \sqrt{N_0} + \hat{\psi}(\vec{x})$$

Da $|\bar{\phi}_0\rangle = |0\rangle$ verschwindet der Beitrag von $\hat{\psi}(\vec{r})$ aus Gl. (18) in normalgeordneten Korrelationen

Wir wollen diese Ideen jetzt auf ein wechselwirkendes Bogegas verallgemeinern und annehmen daß auch

in diesem Fall für $T \ll T_c$ der Grundzustand ein makroskopisch besetzter Zustand mit noch unbekannter Wellenfunktion $\varphi(\vec{r}, t)$ ist.

$$(19) \quad |\psi_0\rangle \approx \frac{1}{N_0!} \left(\int d\vec{r} \varphi(\vec{r}) \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \right)^{N_0} |0\rangle$$

Approximation durch einen entsprechenden kohärenten Zustand und unitäre Transformation analog zu (15)-(18) liefert

$$(20) \quad \begin{array}{l} \hat{\psi}(\vec{r}) \rightarrow \bar{\psi}(\vec{r}) = \sqrt{N_0} \varphi(\vec{r}) + \hat{\psi}(\vec{r}) \\ \text{und} \quad |\psi_0\rangle \rightarrow |\bar{\psi}_0\rangle = |0\rangle \end{array}$$

wobei der letzte Term in Gl. (20) in normalgeordneten Korrelationen keinen Beitrag liefert.

Da im Heisenbergbild $(\hat{\psi}(\vec{r}) \rightarrow \hat{\psi}(\vec{r}, t))$ $\hat{\psi}(\vec{r}, t)$ der Operatorgleichung

$$(21) \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\psi}(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{trap}} + g \hat{\psi}^\dagger \hat{\psi} \right] \hat{\psi}$$

genügt, mit $g = 2 \cdot \frac{2\pi\hbar^2 a}{m}$, muß auch $\varphi(\vec{r}) \rightarrow \varphi(\vec{r}, t)$

$$(22) \quad \boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{trap}} + g N_0 |\varphi|^2 \right] \varphi}$$

zeitabhängige Gross-Pitaevski Gleichung

Im großkanonischen Ensemble ist der Grundzustand durch

$$(23) \quad \langle \hat{H} - \mu \hat{N} \rangle = \min$$

gegeben. Nach der unitären Transformation (20) ergibt sich

$$(24) \quad \langle \hat{H} - \mu \hat{N} \rangle = N_0 \int d^3 \vec{r} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \varphi^* \Delta \varphi + V |\varphi|^2 + \frac{g}{2} N_0 |\varphi|^4 - \mu |\varphi|^2 \right) = \min$$

Das chemische Potential ist dabei so gewählt, daß

$$(25) \quad \langle \hat{N} \rangle = N_0 = N_0 \int d^3 \vec{r} |\varphi|^2$$

d.h. es kann in (24) als Lagrangeparameter angesehen werden. Variation nach φ liefert

$$(26) \quad \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{trap}} + g N_0 |\varphi|^2 \right) \varphi = \mu \varphi$$

zeitunabhängige Gross-Pitaevski Gleichung